
Die molekulardynamische Simulation strahlender Plasmen

Christian Herzing



München 2016

Die molekulardynamische Simulation strahlender Plasmen

Christian Herzing

Dissertation
an der Fakultät für Physik
der Ludwig-Maximilians-Universität
München

vorgelegt von
Christian Herzing
aus Bamberg

München, den 10. November 2016

Erstgutachter: Prof. Dr. Hartmut Ruhl

Zweitgutachter: Prof. Dr. Thomas Fennel

Tag der mündlichen Prüfung: 14. März 2017

Inhaltsverzeichnis

I	Das theoretische Modell	1
1	Die grundlegenden Bewegungsgleichungen	5
1.1	Die Vlasov-Gleichung für e^- und e^+	5
1.2	Die Maxwell-Gleichungen	5
1.3	Die Energie-Impuls-Tensoren	6
1.4	Herleitung der Bewegungsgleichungen für Quasiteilchen	6
1.4.1	Das Konzept der Quasiteilchen	6
1.4.2	Die Lösung der Maxwell-Gleichungen	7
1.4.3	Die Dynamik der Energie-Impuls-Tensoren	8
1.4.4	Bewegungsgleichungen der Quasiteilchen	10
1.5	Grundgleichungen	11
II	Das numerische Verfahren	13
2	Integration der Trajektorien	17
2.1	Grundgleichungen	17
2.2	Numerische Integrationsverfahren	18
2.2.1	Leapfrog-Verfahren	19
2.2.2	Boris-Pusher	20
2.2.3	Vay-Pusher	22
2.2.4	Nyström-Methode	24
2.2.5	Verallgemeinerte Nyström-Integratoren	24
2.2.6	Adaptive Schrittweitenregelung	30
2.3	Vergleich der vorgestellten Verfahren	33
2.4	Interpolation der Trajektorien	34
2.5	Setup und Umgang mit Singularitäten	37
2.5.1	Neutrale Atome	37

2.5.2	Annihilierung von Elektron-Positron-Paaren	38
2.6	Beispiel: Strahlungsdämpfung im homogenen B -Feld	39
3	Hybride Felder	43
3.1	Die numerische Integration der Maxwell-Gleichungen	44
3.1.1	Maxwell-Gleichungen	44
3.1.2	Maxwell-Solver	44
3.2	Hybrider Ansatz für die Felder	47
3.2.1	Aufteilung in Nah- und Fernfelder	48
3.2.2	Propagation der Teilchen über Boxgrenzen	55
3.2.3	Konvergenz	58
3.2.4	Setup der Fernfelder	59
3.3	Vergleich mit PIC-Simulationen	62
3.3.1	Das Particle-In-Cell-Verfahren	62
3.3.2	Vergleich der Streuung zweier Teilchen mit PIC und hybridem Verfahren	63
3.3.3	Weitere Unterschiede zum PIC-Verfahren	64
3.4	Laufzeit	66
3.4.1	Liénard-Wiechert-Auswertungen pro Zeitschritt	66
3.4.2	Laufzeitmessung	69
3.4.3	Beispiel: Rechenaufwand bei der Zwei-Teilchen-Streuung	71
3.5	Parallelisierung des hybriden Verfahrens	73
4	Strahlung und Photonen	77
4.1	Frequenz- und Winkelverteilung klassischer Strahlung	77
4.2	Numerische Berechnung	79
4.3	Photonenspektrum	83
4.4	Synchrotronstrahlung	84
4.5	Strahlungsemission bei Streuprozessen	86
III	Zusammenfassung und Ausblick	89
IV	Anhang	93
A	Numerische Filter	97
A.1	Nyquist-Frequenz	97

A.2	Diskrete Fourier-Transformation	98
A.3	Beispiel mit zwei ebenen Wellen	99
B	Berechnung der Fresnel-Integrale $C(x)$ und $S(x)$	101
C	Dämpfung in Liénard-Wiechert-Feldern	107
D	Normierung	115
D.1	Entdimensionalisierung	115
D.2	Dimensionslose Gleichungen	116

Abbildungsverzeichnis

1.1	Schnittpunkt der Trajektorie eines Teilchens mit dem Rückwärtslichtkegel des Beobachtungspunktes im Minkowskiraum .	9
2.1	H^+D^+ -Streuung	33
2.2	Konvergenz einiger Verfahren	34
2.3	Potentialtopf und elektrisches Feld eines Ionenrumpfes	38
2.4	Ionisierung eines Systems aus $5 \times 5 \times 5$ Atomen durch eine externe ebene Welle	41
2.5	Annäherung eines e^+e^- -Paares bis zur Paarvernichtung	42
2.6	Strahlungsdämpfung eines Teilchens im homogenen Magnetfeld	42
3.1	Numerische Dispersion	47
3.2	Aufteilung des Raumes in Quader für die Definition von Nah- und Fernbereichen	49
3.3	Grenze zwischen Nah- und Fernfeldbereich eines Teilchens . .	50
3.4	Zeitliche Evolution des Fernfeldes eines gyrierenden Elektrons	54
3.5	Verschiebung des Nahfeldbereichs	55
3.6	Fernfeld eines driftenden Elektrons	56
3.7	Fernfeld der e^-e^- -Streuung zu verschiedenen Zeitpunkten . . .	57
3.8	Fernfeld der e^-e^+ -Streuung zu verschiedenen Zeitpunkten . . .	58
3.9	Streuung von Elektronen an einer ebenen Welle	59
3.10	Fernfeld der Elektronenstreuung an einer ebenen Welle	60
3.11	Hybride Simulation im Vergleich mit der exakten (Liénard-Wiechert) Lösung	61
3.12	Konvergenz der hybriden Simulation gegen die Liénard-Wiechert-Lösung	62
3.13	Abhängigkeit des Streuwinkels vom Stoßparameter bei der e^-e^- -Streuung	64

3.14	Verschiebung des Nahfeldbereichs	69
3.15	Laufzeit der Simulationen in Abhängigkeit von der Teilchenzahl	71
3.16	Vergleich von PIC-Simulation mit dem hybriden Modell	72
3.17	Vergleich von PIC-Simulation mit dem hybriden Modell	74
3.18	Aufteilung der Simulation auf mehrere Prozesse mit den Num- mern 1 bis 9.	76
4.1	Vergleich verschiedener Interpolationsordnungen der Trajek- torien zur Strahlungsberechnung	82
4.2	Synchrotronstrahlung	85
4.3	Felder der e^-e^- -Streuung bei verschiedenen Energien	86
4.4	Spektren der in der Bahnebene emittierten Strahlung der e^-e^- - Streuung	87
4.5	Winkelverteilung der emittierten Strahlung bei verschiedenen Energien	88
4.6	Winkelverteilung der unter dem Winkel θ gegen die Bahnebene emittierten Strahlung	88
A.1	Veranschaulichung des Aliasing-Effekts	98
A.2	Superposition zweier ebener Wellen	99
A.3	Filterung bestimmter Wellenlängen	100

Tabellenverzeichnis

2.1	Butcher-Tableau des ursprünglichen Nyström-Verfahrens . . .	30
2.2	Butcher-Tableau für ein Nyström-Verfahren der Ordnung 5(6)	32
3.1	Gegenüberstellung der Schritte im PIC-Code und im hybriden Code, um das System einen Zeitschritt zu pushen	67
3.2	Anzahl der Feldauswertungen in den einzelnen Teilschritten im hybriden Code	70
3.3	Parameter zweier Beispielsimulationen	73
3.4	Einige Werte der Beispielsimulationen	75

Zusammenfassung

Eine weit verbreitete Methode zur numerischen Simulation eines Systems geladener Teilchen ist das *Particle-In-Cell* (PIC) Verfahren [3]. Das PIC-Verfahren verwendet das Konzept von Quasiteilchen, welche sich gemäß klassischer Bewegungsgleichungen in elektromagnetischen Feldern bewegen. Die Quasiteilchen deponieren gemäß ihren Formfaktoren elektrische Ströme auf einem numerischen Gitter. Die ebenfalls auf dem Gitter definierten Maxwell-Gleichungen werden mit Hilfe eines Maxwell-Solvers, meist dem FDTD-Verfahren, gelöst. Die berechneten elektromagnetischen Felder wirken ihrerseits auf die Quasiteilchen zurück. Die wesentliche Besonderheit des PIC-Verfahrens ist, dass die Formfaktoren der Quasiteilchen auf das Gitter abgestimmt sein müssen. Die endliche Ausdehnung der Quasiteilchen impliziert, dass Streuprozesse bei kleinen Abständen zwischen Letzteren nicht korrekt aufgelöst werden können, da die von den Quasiteilchen erzeugten Felder nah am Zentrum Letzterer gegen Null tendieren und in der Folge sehr hohe Gitterauflösungen erforderlich wären. Auf der anderen Seite sind es gerade die kleinen Abstände, welche meist die wesentlichen Teile der Wechselwirkungsphysik enthalten.

Einen Ansatz die Physik bei kleinen Abständen korrekt zu behandeln bietet das MicPIC-Verfahren [26, 21]. Dieses Verfahren entspricht dem PIC-Verfahren, wobei die Wechselwirkung zwischen nahe benachbarten Teilchen um die Coulombwechselwirkung von Punktteilchen ergänzt wird. Für die Stromdeposition werden Formfaktoren für die Teilchen verwendet. Das oben erwähnte Problem – das Verschwinden der Felder von Quasiteilchen nahe deren Zentrum – soll somit durch die Hinzunahme einer elektrostatischen Punktteilchenwechselwirkung bei kleinen Abständen kompensiert werden. Das MicPIC-Verfahren findet Anwendung in der Simulation lasergetriebener Nanoplasmen hoher Dichte [27, 22].

Das in der vorliegenden Arbeit zur Anwendung kommende dynamische

Framework [24] basiert im Gegensatz zu MicPIC vollständig auf einer relativistischen Molekulardynamik für Punktteilchen ergänzt um Selbstkräfte. Die im Kontext des PIC-Verfahrens verwendete Stromdeposition auf dem Gitter kann allerdings für Punktteilchen nicht übernommen werden. Dies ist auch nicht notwendig, da die innerhalb des dynamischen Frameworks benötigten Felder analytische Lösungen der Maxwell-Gleichungen für Punktteilchen sind.

Bei naiver Betrachtung würde die numerische Komplexität der resultierenden molekulardynamischen Bewegungsgleichungen quadratisch mit der Anzahl der Quasiteilchen skalieren. Durch das Einführen eines hybriden Konzepts aus Nah- und Fernfeldern kann ein Integrationsverfahren entwickelt werden, welches besser als N^2 skaliert, wobei N die Anzahl der Teilchen bezeichnet.

Die Teilchen–Teilchen–Wechselwirkung für Teilchen im Nahfeldbereich kann direkt über die analytisch berechneten Potentiale abgebildet werden, während Letztere für weit entfernte Teilchen mit Hilfe numerisch berechneter Felder auf einem Gitter berechnet wird. Das bei der PIC-Methode verwendete Stromdepositionsverfahren wird in der vorliegenden Arbeit durch geeignete Randwerte für elektromagnetische Felder auf dem Maxwell-Gitter an der Grenze des Nahfeldbereichs ersetzt, welche anschließend mit Hilfe eines Maxwell-Solvers in den Fernfeldbereich propagiert werden.

Das vorgestellte numerische Konzept ist parallelisierbar, so dass Simulationen mit vielen Teilchen auf einem verteilten Großrechner durchgeführt werden können. Somit steht zumindest für die Simulation von Nanoplasmen eine numerische Alternative zur PIC-Methode zur Verfügung, welche wesentliche Verbesserungen bei der Behandlung der Physik bei kleinen Abständen, der Strahlungsdämpfung und der gitterunabhängigen Darstellung elektromagnetischer Felder bietet.

Das in dieser Arbeit entwickelte Konzept ist jedoch nicht auf die Lösung des Vlasov-Maxwell-Systems beschränkt, sondern kann in Zukunft auf viele weitere wechselwirkende Vielteilchensysteme angewendet werden. Wie leicht einzusehen ist, können alle Vielteilchensysteme, bei denen Wechselwirkungen durch Felder beschrieben werden, in Nah- und Fernfeldbereiche unterteilt werden, wobei die Wechselwirkungen in den Nahfeldbereichen direkt über analytische Funktionen und in den Fernfeldbereichen auf einem numerischen Gitter berechnet werden. Es ist zu erwarten, dass mit der in dieser Arbeit vorgestellten Methode weitere langreichweitige Vielteilchensysteme mit hoher Präzision bei kleinen Abständen und guter Skalierung mit der Teilchenzahl

simuliert werden können.

Teil I

Das theoretische Modell

Der erste Teil der vorliegenden Arbeit umfasst das theoretische Modell und die daraus resultierenden Bewegungsgleichungen. Das theoretische Modell beinhaltet eine Vlasov-Gleichung für Elektronen und Positronen, welche mit den Strahlungsfeldern Letzterer gekoppelt ist. Die Strahlungsfelder werden mit Hilfe der Maxwell-Gleichungen und der aus der Vlasov-Gleichung gegebenen Stromdichten berechnet. Durch Einführung eines Quasiteilchenkonzepts werden Bewegungsgleichungen für individuelle Quasiteilchen, gekoppelt an ihr Strahlungsfeld, abgeleitet. Die Bewegungsgleichungen enthalten Terme für die Strahlungsdämpfung, welche die Teilchen aufgrund ihrer Selbstfelder erfahren. Diese Dämpfung wird durch die *Abraham-Lorentz-Dirac*-Gleichung beschrieben. Für numerische Rechnungen wird der Abraham-Lorentz-Dirac-Term durch *Landau-Lifschitz* approximiert. Der erste Teil schließt mit der Diskussion des vollständigen Satzes aller relevanten Gleichungen.

Kapitel 1

Die grundlegenden Bewegungsgleichungen

1.1 Die Vlasov-Gleichung für e^- und e^+

Für die Dynamik der Elektronen und Positronen wird die Gleichung

$$\begin{aligned} (\partial_t + \vec{v} \cdot \partial_{\vec{x}}) [f(x, \vec{p}) + \bar{f}(x, \vec{p})] \\ - e (\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B}) \cdot \partial_{\vec{p}} [f(x, \vec{p}) - \bar{f}(x, \vec{p})] = 0 \end{aligned} \quad (1.1)$$

verwendet [24]. Dabei sind f und \bar{f} die klassischen Verteilungsfunktionen für Elektronen und Positronen.

1.2 Die Maxwell-Gleichungen

Die elektromagnetischen Felder \vec{E} und \vec{B} in (1.1) werden aus den Maxwell-Gleichungen

$$\partial_\mu F^{\mu\nu}(x) = \frac{1}{\varepsilon_0 c^2} j^\nu(x), \quad \partial_\alpha F_{\mu\nu} + \partial_\mu F_{\nu\alpha} + \partial_\nu F_{\alpha\mu} = 0 \quad (1.2)$$

berechnet, wobei der Feldstärketensor $F^\mu{}_\nu$ durch

$$F^\mu{}_\nu(x) = \begin{pmatrix} 0 & \frac{E_x^q}{c} & \frac{E_y^q}{c} & \frac{E_z^q}{c} \\ \frac{E_x^q}{c} & 0 & B_z^q & -B_y^q \\ \frac{E_y^q}{c} & -B_z^q & 0 & B_x^q \\ \frac{E_z^q}{c} & B_y^q & -B_x^q & 0 \end{pmatrix} (x) \quad (1.3)$$

gegeben ist und der Strom j_ν folgendermaßen definiert wird

$$j_\nu(x) = -e \int \frac{d^3p}{p^0} c p_\nu \left(f(x, \vec{p}) - \bar{f}(x, \vec{p}) \right) . \quad (1.4)$$

1.3 Die Energie-Impuls-Tensoren

Für den späteren Gebrauch werden an dieser Stelle der Energie-Impuls-Tensor $t^{\mu\nu M}$ für Materie und $t^{\mu\nu R}$ und für das Strahlungsfeld definiert. Diese sind gegeben durch

$$t^{\mu\nu M} = \int \frac{d^3p}{p^0} c p^\mu p^\nu \left(f + \bar{f} \right) , \quad (1.5)$$

$$t^{\mu\nu R} = \epsilon_0 c^2 \left(F^\mu{}_\alpha F^{\alpha\nu} + \frac{g^{\mu\nu}}{4} F_{\alpha\beta} F^{\alpha\beta} \right) . \quad (1.6)$$

1.4 Herleitung der Bewegungsgleichungen für Quasiteilchen

Ziel dieses Abschnitts ist es, Bewegungsgleichungen für Elektronen und Positronen abzuleiten. Dazu werden die Verteilungsfunktionen f und \bar{f} in geeigneter Weise approximiert. Dieser Ansatz führt auf molekulardynamische Bewegungsgleichungen, gekoppelt an die Maxwellfelder, mit dem Abraham-Lorentz-Dirac-Term für die Strahlungsreaktion [24].

1.4.1 Das Konzept der Quasiteilchen

Die Verteilungsfunktionen f und \bar{f} werden durch neue Verteilungsfunktionen g und \bar{g} in der folgenden Weise approximiert

$$g(\vec{x}, \vec{p}, t) = \sum_q \delta^3(\vec{x} - \vec{x}_q(t)) \delta^3(\vec{p} - \vec{p}_q(t)) , \quad (1.7)$$

$$\bar{g}(\vec{x}, \vec{p}, t) = \sum_q \delta^3(\vec{x} - \vec{x}_q(t)) \delta^3(\vec{p} - \vec{p}_q(t)) . \quad (1.8)$$

Es wird gefordert, dass

$$\|g - f\| < \epsilon , \quad (1.9)$$

$$\|\bar{g} - \bar{f}\| < \bar{\epsilon} \quad (1.10)$$

gilt, wobei $\epsilon, \bar{\epsilon} > 0$ beliebig gelten soll. Es ist anzumerken, dass die neuen Funktionen g und \bar{g} keine kontinuierlichen Funktionen auf dem Phasenraum mehr sind, sondern durch die Zeitfunktionen $\vec{x}_q(t)$ und $\vec{p}_q(t)$ parametrisiert werden. Die Funktionen $\vec{x}_q(t)$ und $\vec{p}_q(t)$ sind die Orte und Impulse sogenannter Quasiteilchen. Es ist das Ziel, Bewegungsgleichungen für Letztere abzuleiten.

1.4.2 Die Lösung der Maxwell-Gleichungen

Im Folgenden sollen zunächst die Maxwell-Gleichungen (1.2) unter Verwendung der Ansatzfunktionen g (1.7) und \bar{g} (1.8) gelöst werden. Für den Strom j_ν (1.4) erhält man

$$j^\nu(x^\alpha) = -ec \sum_q \int d\tau \left[u_q^\nu(\tau) \delta^4(x^\alpha - x_q^\alpha(\tau)) - \bar{u}_q^\nu(\tau) \delta^4(x^\alpha - \bar{x}_q^\alpha(\tau)) \right] . \quad (1.11)$$

und für die retardierten Vektorpotentiale A^μ

$$A^\mu(x^\alpha) = \frac{1}{\epsilon_0 c^2} \int d^4y G_{\text{ret}}(x^\alpha - y^\alpha) j^\mu(y^\alpha) , \quad (1.12)$$

wobei die retardierte Greensfunktion durch

$$G_{\text{ret}}(z^\alpha) = \frac{1}{2\pi} \Theta(z^0) \delta(z^2) , \quad z^\alpha = x^\alpha - y^\alpha \quad (1.13)$$

gegeben ist. Unter Verwendung des Stroms j_ν (1.11) und der retardierten Greensfunktion (1.13) können die expliziten Lösungen für die retardierten Potentiale (1.12) angegeben werden. Diese sind die Liénard-Wiechert-Potentiale

$$A^\mu(x) = -\frac{e}{4\pi\epsilon_0 c} \sum_q \left[\frac{u_q^\mu(\tau_{q\text{ret}})}{u_q^\alpha(\tau_{q\text{ret}}) [x_\alpha - x_{\alpha q}(\tau_{q\text{ret}})]} - \frac{\bar{u}_q^\mu(\bar{\tau}_{q\text{ret}})}{\bar{u}_q^\alpha(\bar{\tau}_{q\text{ret}}) [x_\alpha - \bar{x}_{\alpha q}(\bar{\tau}_{q\text{ret}})]} \right] , \quad (1.14)$$

wobei die Retardierungsbedingungen

$$(x - x_q(\tau_{q\text{ret}}))^\alpha (x - x_q(\tau_{q\text{ret}}))_\alpha = 0 \quad (1.15)$$

zu erfüllen sind. In Dreiernotation lauten die Liénard-Wiechert-Potentiale

$$\Phi(\vec{x}, t) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \left[\frac{e}{(1 - \vec{\beta} \cdot \vec{n})R} \right]_{\text{ret}} \quad (1.16)$$

$$\vec{A}(\vec{x}, t) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0 c} \left[\frac{e\vec{\beta}}{(1 - \vec{\beta} \cdot \vec{n})R} \right]_{\text{ret}} . \quad (1.17)$$

Aus den Liénard-Wiechert-Potentialen (1.16) und (1.17) lassen sich die retardierten elektrischen und magnetischen Felder berechnen [12]. Diese lauten explizit

$$\begin{aligned} \vec{E}(\vec{x}, t) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \left(\left[\frac{\vec{n} - \vec{\beta}}{\gamma^2(1 - \vec{\beta} \cdot \vec{n})^3 R^2} \right]_{\text{ret}} \right. \\ \left. + \frac{1}{c} \left[\frac{\vec{n} \times [(\vec{n} - \vec{\beta}) \times \dot{\vec{\beta}}]}{(1 - \vec{\beta} \cdot \vec{n})^3 R} \right]_{\text{ret}} \right) , \end{aligned} \quad (1.18)$$

$$\vec{B}(\vec{x}, t) = \frac{1}{c} [\vec{n} \times \vec{E}]_{\text{ret}} , \quad (1.19)$$

wobei $R = |\vec{x} - \vec{x}_p|$, $\vec{n} = (\vec{x} - \vec{x}_p)/R$ und $\vec{\beta} = \dot{\vec{x}}_p/c$ sind. Aufgrund der endlichen Ausbreitungsgeschwindigkeit des Lichts müssen die Felder, welche man zum Zeitpunkt t beobachtet, bereits zu einem früheren Zeitpunkt t_{ret} erzeugt worden sein. Die Zeitdifferenz $t - t_{\text{ret}}$ ist gleich der Lichtlaufzeit vom emittierenden Teilchen zum Beobachter

$$c(t - t_{\text{ret}}) = |\vec{x} - \vec{x}_p(t_{\text{ret}})| . \quad (1.20)$$

Wie im Raumzeitdiagramm Abb. 1.1 zu erkennen ist, wird die retardierte Zeit t_{ret} durch den Schnittpunkt der Teilcentrajektorie mit dem Rückwärtslichtkegel des Beobachtungspunktes (\vec{x}, t) im Minkowskiraum festgelegt.

1.4.3 Die Dynamik der Energie-Impuls-Tensoren

Als Nächstes wird eine dynamische Gleichung für den Energie-Impuls-Tensor (1.5) entlang der Weltlinien der Quasiteilchen hergeleitet. Dazu wird der Ort eines Quasiteilchens $\vec{x}_p(t)$ betrachtet und es wird ein kugelförmiges Volumen $V_p(t)$ mit Radius R_{sp} um dieses gelegt. Der Radius wird so gewählt, dass sich kein zweites Quasiteilchen $\vec{x}_q(t)$ mit $q \neq p$ in dem Volumen $V_p(t)$ befindet. Es wird also $|\vec{x}_p(t) - \vec{x}_q(t)| > R_{\text{sp}}$ gefordert. Die Felder innerhalb des

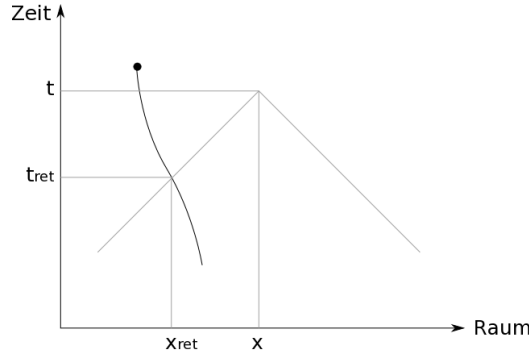


Abbildung 1.1: Schnittpunkt der Trajektorie eines Teilchens mit dem Rückwärtslichtkegel des Beobachtungspunktes im Minkowskiraum

Volumens $V_p(t)$ sind die retardierten Felder der Quelle am Punkt $x_p^\mu(\tau_{p\text{ret}})$ plus die retardierten Felder (2.5) und (2.6) aller anderen Teilchen außerhalb des Volumens. Diese definieren die externen Felder im Volumen $V_p(t)$. Unter Verwendung der Vlasov-Gleichung (1.1) erhält man eine dynamische Gleichung für den Energie-Impuls-Tensor (1.5) innerhalb des Volumens $V_p(t)$. Diese lautet

$$\partial_\nu t^{\mu\nu M}_p = (F^{\mu\nu}_p + F^{\mu\nu}_{\text{ext}}) j_{\nu p}, \quad F^{\mu\nu}_{\text{ext}} = \sum_{q \neq p} F^{\mu\nu}_q, \quad (1.21)$$

$$j^\nu_p(x^\alpha) = -ec \int d\tau u_p^\nu(\tau) \delta^4(x^\alpha - x_p^\alpha(\tau)). \quad (1.22)$$

Um eine dynamische Gleichung für den Energie-Impuls-Tensor des Strahlungsfeldes (1.6) zu erhalten, wird nur das Feld des Quasiteilchens p innerhalb des Volumens V_p betrachtet. Es gilt

$$\partial_\nu t^{\mu\nu R}_p = -F^{\mu\nu}_p j_{\nu p}, \quad (1.23)$$

wobei

$$\begin{aligned} \frac{1}{\epsilon_0 c^2} \partial_\nu t^{\mu\nu} &= \partial_\nu (F^\mu_\alpha F^{\alpha\nu}) + \frac{1}{4} \partial^\mu (F^{\alpha\beta} F_{\alpha\beta}) \\ &= (\partial_\nu F^\mu_\alpha) F^{\alpha\nu} + (\partial_\nu F^{\alpha\nu}) F^\mu_\alpha + \frac{1}{2} F_{\alpha\beta} (\partial^\mu F^{\alpha\beta}) \\ &= -\frac{1}{\epsilon_0 c^2} F^\mu_\alpha j^\alpha + \frac{1}{2} F_{\alpha\nu} (\partial^\nu F^{\mu\alpha} + \partial^\alpha F^{\mu\nu}) \\ &= -\frac{1}{\epsilon_0 c^2} F^\mu_\alpha j^\alpha \end{aligned} \quad (1.24)$$

verwendet worden ist. Durch Addition von (1.21) und (1.23) erhält man die Gleichung

$$\partial_\nu \left(t^{\mu\nu M}_p + t^{\mu\nu R}_p \right) = F^{\mu\nu}_{\text{ext}} j_{\nu p} . \quad (1.25)$$

1.4.4 Bewegungsgleichungen der Quasiteilchen

Die Herleitung der Bewegungsgleichungen wird detailliert in [24] beschrieben.

Die in [24] diskutierte Herleitung basiert auf dem vom Quasiteilchen p erzeugten Strom (1.11), der in (1.23) eingesetzt und über das Volumen V_p integriert wird. Man erhält

$$\int_{V_p} d^3x \left[\partial_\nu t^{\mu\nu R}_p \right] = \frac{q_p}{\gamma(\tau_p)} F^{\mu\nu}_{p \text{ ret}} [x(\tau_p)] u_{\nu p}(\tau_p) . \quad (1.26)$$

Wie durch Entwicklung der Weltlinie des Teilchens p um den Retardierungszeitpunkt τ_{ret} gezeigt werden kann [24], führt dies nach längerer Rechnung auf die Abraham-Lorentz-Dirac-Gleichung

$$\frac{dx^\mu}{d\tau} = u^\mu , \quad (1.27)$$

$$m_e \frac{du^\mu}{d\tau} = e F^\mu_{\nu \text{ ext}} u^\nu + \frac{\mu_0 e^2}{6\pi c} \left(\frac{d^2 u^\mu}{d\tau^2} - \frac{1}{c^2} u^\mu u^\nu \frac{d^2 u_\nu}{d\tau^2} \right) . \quad (1.28)$$

Hierbei bezeichnet $\mu_0 = 1/(\varepsilon_0 c^2)$ die Vakuumpermeabilität. Es ist üblich, den Teil der Kraft, den ein Teilchen aufgrund seines Selbstfeldes erfährt, zu einem Dämpfungsterm g^μ zusammenzufassen. Die Bewegungsgleichungen (1.28) lauten dann wie folgt

$$\frac{dx^\mu}{d\tau} = u^\mu , \quad (1.29)$$

$$m_e \frac{du^\mu}{d\tau} = e F^\mu_{\nu \text{ ext}} u^\nu + g^\mu , \quad (1.30)$$

wobei

$$g^\mu = \frac{\mu_0 e^2}{6\pi c} \left(\frac{d^2 u^\mu}{d\tau^2} - \frac{1}{c^2} u^\mu u^\nu \frac{d^2 u_\nu}{d\tau^2} \right) \quad (1.31)$$

die Strahlungsdämpfung ist. Die Strahlungsdämpfung wurde historisch zunächst nichtrelativistisch durch die Abraham-Lorentz-Gleichung beschrieben

und 1938 durch Dirac zu der obigen relativistischen Gleichung verallgemeinert [5]. Diese Gleichung hat jedoch wie bereits die historische nichtrelativistische Version unphysikalische, kausalitätsverletzende Lösungen [23, 18]. Um diese unphysikalischen Lösungen zu vermeiden, behandeln Landau und Lifschitz die Strahlungsdämpfung als Störung [15]. Eine modernere Diskussion des Sachverhaltes findet sich in [25]. Die resultierende Gleichung ist unter dem Namen *Landau-Lifschitz-Gleichung* bekannt. Sie lautet

$$g^\mu = \frac{\mu_0 e^2}{6\pi c} \left(\frac{e}{m_e} \frac{\partial F^{\mu\nu}_{\text{ext}}}{\partial x^\xi} u^\nu u^\xi - \frac{e^2}{m_e^2} F^{\mu\xi}_{\text{ext}} F_{\nu\xi\text{ext}} u^\nu + \frac{e^2}{m_e^2 c^2} (F_{\nu\xi\text{ext}} u^\xi)(F^{\nu\pi}_{\text{ext}} u_\pi) u^\mu \right). \quad (1.32)$$

In dieser Arbeit wird die Landau-Lifschitz-Gleichung zur Beschreibung der Strahlungsdämpfung g^μ verwendet. Wie eine einfache Abschätzung [12] zeigt, spielen sich die Effekte der Strahlungsdämpfung auf Zeitskalen von

$$\tau = \frac{1}{6\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{mc^3} = 6.62 \cdot 10^{-24} \text{ s} \quad (1.33)$$

ab. Bei einer kreisförmigen Bewegung eines Teilchens mit einer Kreisfrequenz ω_0 können die Strahlungseffekte demnach nur dann vernachlässigt werden, wenn

$$\omega_0 \tau \ll 1 \quad (1.34)$$

gilt.

1.5 Grundgleichungen

Die in dieser Arbeit verwendeten Grundgleichungen sind im Folgenden noch einmal zusammengestellt. Sie bestehen aus den Lorenz-Abraham-Dirac-Gleichungen

$$\frac{dx^\mu}{d\tau} = u^\mu, \quad (1.35)$$

$$m_e \frac{du^\mu}{d\tau} = e F^\mu_{\nu\text{ext}} u^\nu + g^\mu \quad (1.36)$$

mit der Landau-Lifschitz-Approximation für die Selbstkraft

$$g^\mu = \frac{\mu_0 e^2}{6\pi c} \left(\frac{e}{m_e} \frac{\partial F^{\mu\nu}_{\text{ext}}}{\partial x^\xi} u^\nu u^\xi - \frac{e^2}{m_e^2} F^{\mu\xi}_{\text{ext}} F_{\nu\xi \text{ext}} u^\nu + \frac{e^2}{m_e^2 c^2} (F_{\nu\xi \text{ext}} u^\xi) (F^{\nu\pi}_{\text{ext}} u_\pi) u^\mu \right) (x_p^\mu) \quad (1.37)$$

gekoppelt an ein externes elektromagnetisches Feld

$$F^\mu_{\nu \text{ext}} (x_p^\mu) = \sum_{q \neq p} F^\mu_{\nu q} (x_p^\mu), \quad (1.38)$$

$$F^\mu_{\nu q} (x_p^\mu) = \begin{pmatrix} 0 & \frac{E_x^q}{c} & \frac{E_y^q}{c} & \frac{E_z^q}{c} \\ \frac{E_x^q}{c} & 0 & B_z^q & -B_y^q \\ \frac{E_y^q}{c} & -B_z^q & 0 & B_x^q \\ \frac{E_z^q}{c} & B_y^q & -B_x^q & 0 \end{pmatrix} (x_p^\mu) \quad (1.39)$$

mit den retardierten Feldstärken

$$\vec{E}(\vec{x}, t) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \left(\left[\frac{\vec{n} - \vec{\beta}}{\gamma^2(1 - \vec{\beta} \cdot \vec{n})^3 R^2} \right]_{\text{ret}} + \frac{1}{c} \left[\frac{\vec{n} \times [(\vec{n} - \vec{\beta}) \times \dot{\vec{\beta}}]}{(1 - \vec{\beta} \cdot \vec{n})^3 R} \right]_{\text{ret}} \right), \quad (1.40)$$

$$\vec{B}(\vec{x}, t) = \frac{1}{c} [\vec{n} \times \vec{E}]_{\text{ret}}, \quad (1.41)$$

wobei

$$R = |\vec{x} - \vec{x}_q|, \quad \vec{n} = (\vec{x} - \vec{x}_q)/R, \quad \vec{\beta} = \frac{\dot{\vec{x}}_q}{c} \quad (1.42)$$

gilt. Aufgrund der endlichen Ausbreitungsgeschwindigkeit des Lichts müssen die Felder (1.40) und (1.41), welche man zum Zeitpunkt t beobachtet, bereits zu einem früheren Zeitpunkt t_{ret} erzeugt worden sein. Die Zeitdifferenz $t - t_{\text{ret}}$ ist gleich der Lichtlaufzeit vom emittierenden Teilchen zum Beobachter

$$c(t - t_{\text{ret}}) = |\vec{x} - \vec{x}_q(t_{\text{ret}})|. \quad (1.43)$$

gilt. Die Terme in (1.40) und (1.41) sind zur Zeit t_{ret} auszuwerten, was durch den Zusatz „ret“ an den Klammern ausgedrückt wird. An dieser Stelle muss die Behandlung der Singularitäten in den elektrischen und magnetischen Feldern diskutiert werden. Dies soll jedoch erst in Abschnitt 2.5 behandelt werden.

Teil II

Das numerische Verfahren

Nachdem im ersten Teil der vorliegenden Arbeit die grundlegenden Gleichungen vorgestellt worden sind, wird im zweiten Teil ein Verfahren zur numerischen Integration Letzterer behandelt.

Der zweite Teil umfasst die Kapitel 2 bis 4. In Kapitel 2 werden verschiedene Methoden zur numerischen Integration der Bewegungsgleichungen in äußeren Feldern vorgestellt. Es wird die Konvergenzgeschwindigkeit der vorgestellten Verfahren erörtert und die optimalen Zeitschrittweiten der Verfahren diskutiert. In Kapitel 3 wird ein hybrider Ansatz zur Berechnung der Felder vorgestellt. Der hybride Ansatz besteht darin, dass ein Teil der Felder über Liénard-Wiechert-Potentiale und ein weiterer Teil auf einem Gitter dargestellt wird. Die Felder auf dem Gitter werden mit Hilfe eines Maxwell-Solvers berechnet. Der hybride Ansatz wird mit Particle-In-Cell (PIC) Simulationen verglichen. Es zeigt sich anhand der vorgestellten Beispiele, dass die Streuung zwischen Teilchen deutlich besser als mit der PIC-Methode abgebildet wird. Es zeigt sich weiterhin, dass die Laufzeiten der Hybridsimulationen unter geeigneten Voraussetzungen linear mit der Teilchenzahl skalieren. Es wird zudem diskutiert, wie sich das Hybridmodell parallelisieren lässt. In Kapitel 4 wird das Hybridmodell durch die Hinzunahme von Photonen auf die Beschreibung kurzer Wellenlängen der Felder ausgedehnt. Durch Berechnung der klassischen Strahlungsemission bei der Teilchenstreuung wird gezeigt, dass das Photonenmodell eine gute Approximation an die Strahlungsphysik bei kurzen Wellenlängen darstellt.

Kapitel 2

Numerische Integration der Teilchentrajektorien

In diesem Kapitel soll die numerische Integration der Bewegungsgleichungen (2.1) und (2.2) für die Quasielemente diskutiert werden. Die Quasielemente werden zukünftig auch als *Teilchen* bezeichnet. Der Schwerpunkt der Diskussion liegt in diesem Kapitel auf der Integration der Trajektorien. Eine Methode zur effektiven Berechnung der Felder wird im nächsten Kapitel vorgestellt.

2.1 Grundgleichungen

Für die numerische Behandlung der in Abschnitt 1.5 zusammengefassten Grundgleichungen sollen diese im Folgenden in dimensionslosen Einheiten verwendet werden. Die dimensionslosen Einheiten sind in Anhang D erläutert. In diesen Einheiten lauten die Grundgleichungen

$$\frac{dx^\mu}{ds} = u^\mu, \quad (2.1)$$

$$\frac{du^\mu}{ds} = F^\mu{}_{\nu \text{ ext}}(x^\mu) u^\nu + g^\mu(x^\mu), \quad (2.2)$$

$$g^\mu = \frac{2}{3} \left(\frac{\partial F^{\mu\nu}{}_{\text{ext}}}{\partial x^\xi} u^\nu u^\xi - F^{\mu\xi}{}_{\text{ext}} F_{\nu\xi \text{ ext}} u^\nu \right. \\ \left. + (F_{\nu\xi \text{ ext}} u^\xi)(F^{\nu\pi}{}_{\text{ext}} u_\pi) u^\mu \right) (x^\mu), \quad (2.3)$$

$$F^\mu_{\nu \text{ ext}}(x^\mu) = \begin{pmatrix} 0 & E_x & E_y & E_z \\ E_x & 0 & B_z & -B_y \\ E_y & -B_z & 0 & B_x \\ E_z & B_y & -B_x & 0 \end{pmatrix} (x^\mu) , \quad (2.4)$$

$$\vec{E}^q(\vec{x}, t) = \left[\frac{\vec{n} - \vec{\beta}}{\gamma^2(1 - \vec{\beta} \cdot \vec{n})^3 R^2} \right]_{\text{ret}} + \left[\frac{\vec{n} \times [(\vec{n} - \vec{\beta}) \times \dot{\vec{\beta}}]}{(1 - \vec{\beta} \cdot \vec{n})^3 R} \right]_{\text{ret}} , \quad (2.5)$$

$$\vec{B}^q(\vec{x}, t) = [\vec{n} \times \vec{E}]_{\text{ret}} , \quad (2.6)$$

wobei

$$R = |\vec{x} - \vec{x}_q| , \quad \vec{n} = (\vec{x} - \vec{x}_q)/R , \quad \vec{\beta} = \frac{\dot{\vec{x}}_q}{c} , \quad (2.7)$$

$$t - t_{\text{ret}} = |\vec{x} - \vec{x}_q(t_{\text{ret}})| \quad (2.8)$$

gilt. \vec{E}^q und \vec{B}^q in Gleichungen (2.5) und (2.6) sind die von einem Teilchen q erzeugten Felder. Die Gleichungen (2.1)-(2.8) gelten jeweils für jedes Teilchen p . Zur besseren Übersicht wird der Teilchenindex p in den Gleichungen weggelassen.

2.2 Numerische Integrationsverfahren

Einleitend werden die verwendeten numerischen Verfahren zur Integration der Bewegungsgleichungen (2.1) und (2.2) vorgestellt. Das Leapfrog-Verfahren ist ein sehr schnelles, explizites Integrationsverfahren zur Berechnung der Teilchenbewegung in elektrischen Feldern. Es dient als Basis für die darauf aufbauenden Verfahren, den Boris- und den Vay- Pusher. Letztere erweitern das Leapfrog-Verfahren und ermöglichen die Berechnung der Teilchentrajektorien in beliebigen elektromagnetischen Feldern. Der Boris-Pusher erhält das Phasenraumvolumen exakt und weist daher über lange Simulationszeiten hinweg eine numerisch stabile Energieerhaltung auf. Des Weiteren ist das Verfahren explizit und es ist pro Zeitschritt nur eine einzige Auswertung des Kraftterms nötig. Somit ist das Verfahren bezüglich des Rechenaufwands sehr günstig. Der Vay-Pusher ist eine Abwandlung des Boris-Pushers und verbessert dessen Stabilität bezüglich Lorentz-Transformationen. Das Leapfrog-Verfahren sowie dessen Erweiterungen, der Boris- und der Vay-

Pusher, sind von der Konvergenzordnung 2. Für sehr exakte Berechnungen von Teilcentrajektorien ist ein Verfahren von höherer Konvergenzordnung wie das Nyström-Verfahren nötig. Um Trajektorien über längere Zeiten hinweg akkurat integrieren zu können, wird des Weiteren eine adaptive Regelung der Integrationsschrittweite benötigt. Dies kann durch eingebettete Nyström-Verfahren realisiert werden. Die in dieser Arbeit vorgestellten Nystöm-Verfahren sind explizite Verfahren, was eine schnelle Berechnung ermöglicht. Durch die Verwendung von impliziten Verfahren kann die Genauigkeit noch weiter erhöht werden [6].

2.2.1 Leapfrog-Verfahren

Das Leapfrog-Verfahren eignet sich zur Integration der Bewegungsgleichungen bei rein elektrischen Feldern oder, allgemein, zur Integration von Bewegungsgleichungen, bei welchen die Kraft auf ein Teilchen lediglich von dessen Position, nicht jedoch von dessen Geschwindigkeit abhängt. Eine solche Bewegungsgleichung für ein Teilchen ist von der Form

$$\frac{d^2 x^\mu}{ds^2} = \frac{du^\mu}{ds} = f^\mu(x^\nu). \quad (2.9)$$

wobei f^μ eine Kraft bezeichnet. Beim Leapfrog-Verfahren werden für die Diskretisierung zentrierte finite Differenzen

$$\frac{x^{\mu n+1} - x^{\mu n}}{\Delta s} = u^{\mu n+\frac{1}{2}}, \quad \frac{u^{\mu n+\frac{1}{2}} - u^{\mu n-\frac{1}{2}}}{\Delta s} = f^\mu(x^{\nu n}) \quad (2.10)$$

verwendet, wobei $x^{\mu n}$ den numerischen Wert des Raumzeitpunkts x^μ zum Eigenzeitpunkt $s^n = n \cdot \Delta s$ approximiert und $\Delta s = s^{n+1} - s^n$ gilt. Die Zeitpunkte mittig zwischen den diskreten Zeitpunkten s^n werden mit Hilfe eines halbzahligen Index bezeichnet. Der Zeitpunkt in der Mitte zwischen s^n und s^{n+1} ist somit

$$s^{n+\frac{1}{2}} = \frac{s^n + s^{n+1}}{2}. \quad (2.11)$$

Die Größe $u^{\mu n+\frac{1}{2}}$ ist die Geschwindigkeit u^μ zum Zeitpunkt $s^{n+\frac{1}{2}}$. Die Werte für die Position x^μ und die Geschwindigkeit u^μ werden in diesem Verfahren somit nicht zu den gleichen Zeitpunkten berechnet. Stattdessen sind die Zeitpunkte für x^μ und u^μ um $\frac{\Delta s}{2}$ gegeneinander versetzt.

Wie man leicht nachrechnen kann, ist dieses Verfahren durch die Verwendung von zentrierten finiten Differenzen von der Konvergenzordnung 2. Zwei Eigenschaften machen dieses Verfahren für die Integration von Hamiltonschen Systemen interessant. Zum einen ist das Integrationsverfahren invariant bezüglich Zeitumkehr. Werden ausgehend von einem Anfangszustand n Schritte integriert, wird anschließend die Integrationsrichtung umgekehrt und werden wiederum n Schritte integriert, so ergibt dies exakt den Anfangszustand. Zum anderen ist das Integrationsverfahren symplektisch. Das bedeutet, es erhält exakt das Phasenraumvolumen. Daraus folgt die exakte Erhaltung des Impulses und der Winkelgeschwindigkeit.

2.2.2 Boris-Pusher

Der Boris-Pusher wurde 1970 von J. P. Boris [2] vorgeschlagen. Letzterer ist eine Erweiterung des Leapfrog-Verfahrens, um auch die Bewegung von Teilchen in magnetischen Feldern integrieren zu können. Um die folgenden Erläuterungen einfacher zu halten, sollen die Bewegungsgleichungen (2.1) und (2.2) in Dreiernotation betrachtet werden. Sie lauten

$$\frac{d\vec{x}}{dt} = \vec{v}, \quad (2.12)$$

$$\frac{d\vec{p}}{dt} = e \left(\vec{E}(\vec{x}, t) + \vec{v} \times \vec{B}(\vec{x}, t) \right). \quad (2.13)$$

Der Zusammenhang zwischen der Geschwindigkeit \vec{v} und dem Impuls \vec{p} ist allgemein bekannt und lautet

$$\vec{v} = \frac{c\vec{p}}{\sqrt{m_e^2 c^2 + \vec{p}^2}}. \quad (2.14)$$

Ebenso wie beim Leapfrog-Verfahren sollen auch hier die Werte für \vec{x} und \vec{p} zu diskreten Zeitpunkten t_i berechnet werden. Hierzu wird die Bewegungsgleichung zunächst wieder diskretisiert. Die Diskretisierung lautet

$$\frac{\vec{x}^{n+\frac{1}{2}} - \vec{x}^{n-\frac{1}{2}}}{\Delta t} = \vec{v}^n, \quad (2.15)$$

$$\frac{\vec{p}^{n+1} - \vec{p}^n}{\Delta t} = e \left(\vec{E}^{n+\frac{1}{2}} + \vec{v}^{n+\frac{1}{2}} \times \vec{B}^{n+\frac{1}{2}} \right). \quad (2.16)$$

Ziel ist, es zu gegebenen Werten von $\vec{x}^{n-\frac{1}{2}}$, \vec{p}^n und gegebenen Feldern die Werte $\vec{x}^{n+\frac{1}{2}}$ und \vec{p}^{n+1} zu berechnen. Die Berechnung von $\vec{x}^{n+\frac{1}{2}}$ folgt direkt aus der Diskretisierung (2.15) und lautet

$$\vec{x}^{n+\frac{1}{2}} = \vec{x}^{n-\frac{1}{2}} + \Delta t \vec{v}^n. \quad (2.17)$$

Die Berechnung von \vec{p}^{n+1} ist nicht direkt aus der Diskretisierung (2.16) ersichtlich, da der Wert der Geschwindigkeit $\vec{v}^{n+\frac{1}{2}}$ nicht explizit vorliegt. Dieser kann durch

$$\vec{v}^{n+\frac{1}{2}} := \frac{\vec{p}^n + \vec{p}^{n+1}}{2m_e \gamma^{n+\frac{1}{2}}} \quad (2.18)$$

approximiert werden. Die Approximation für den Lorentzfaktor $\gamma^{n+\frac{1}{2}}$ lautet

$$\gamma^{n+\frac{1}{2}} := \sqrt{1 + \left| \frac{\vec{p}^n}{m_e} + \frac{q\Delta t}{2m_e} \vec{E}^{n+\frac{1}{2}} \right|^2} = \sqrt{1 + \frac{|\vec{p}_-|^2}{m_e^2}}. \quad (2.19)$$

Im Folgenden werden die Substitutionen

$$\vec{p}_- := \vec{p}^n + \frac{\Delta t}{2} e \vec{E}^{n+\frac{1}{2}}, \quad \vec{p}_+ := \vec{p}^{n+1} - \frac{\Delta t}{2} e \vec{E}^{n+\frac{1}{2}} \quad (2.20)$$

verwendet. Dies ergibt eine diskretisierte Bewegungsgleichung, deren rechte Seite nicht mehr vom elektrischen Feld \vec{E} abhängt. Sie lautet

$$\frac{\vec{p}_+ - \vec{p}_-}{\Delta t} = e \left(\vec{v}^{n+\frac{1}{2}} \times \vec{B}^{n+\frac{1}{2}} \right). \quad (2.21)$$

Ersetzen von $\vec{v}^{n+\frac{1}{2}}$ ergibt die implizite Gleichung

$$\frac{\vec{p}_+ - \vec{p}_-}{\Delta t} = \frac{e}{2m_e \gamma^{n+\frac{1}{2}}} (\vec{p}_+ + \vec{p}_-) \times \vec{B}^{n+\frac{1}{2}}. \quad (2.22)$$

Gleichung (2.22) kann explizit nach \vec{p}_+ aufgelöst werden [2]. Es ergibt sich

$$\vec{p}_\sim = \vec{p}_- + f_1 \left(\vec{p}_- \times \vec{B}^{n+\frac{1}{2}} \right), \quad (2.23)$$

$$\vec{p}_+ = \vec{p}_- + f_2 \left(\vec{p}_\sim \times \vec{B}^{n+\frac{1}{2}} \right), \quad (2.24)$$

wobei

$$f_1 = \frac{\tan\left(\frac{e\Delta t}{2\gamma m_e} \left| \vec{B}^{n+\frac{1}{2}} \right| \right)}{\left| \vec{B}^{n+\frac{1}{2}} \right|}, \quad (2.25)$$

$$f_2 = \frac{2f_1}{1 + f_1^2 \left| \vec{B}^{n+\frac{1}{2}} \right|^2} \quad (2.26)$$

gilt. Aus \vec{p}_+ kann direkt \vec{p}^{n+1} berechnet werden. Zwischen \vec{p}^n und \vec{v}^n besteht der bekannte Zusammenhang

$$\vec{v}^n = \frac{c\vec{p}^n}{\sqrt{m_e^2 c^2 + |\vec{p}^n|^2}}. \quad (2.27)$$

Im Falle eines verschwindenden magnetischen Feldes $\vec{B} = 0$ reduziert sich das Boris-Verfahren auf das Leapfrog-Verfahren in Dreinotation.

2.2.3 Vay-Pusher

Der Vay-Pusher wurde 2008 von Jean-Luc Vay [28] vorgeschlagen und ist eine Verbesserung des Boris-Pushers. Bei Verwendung des Boris-Pushers stellt sich heraus, dass das Ergebnis der Integration aufgrund numerischer Fehler davon abhängt, in welchem Bezugssystem die Integration durchgeführt wird. Allerdings sollte es keinen Unterschied machen, wenn man vor der Integration die (externen) Felder mittels einer Lorentz-Transformation in ein anderes Bezugssystem transformiert, die numerische Integration in diesem Bezugssystem durchführt und die berechneten Trajektorien der Teilchen anschließend in das ursprüngliche Bezugssystem transformiert. Im Gegensatz zum Boris-Pusher ist der Vay-Pusher bezüglich derartiger Transformationen stabil. Die Diskretisierung der Bewegungsgleichung ist die gleiche wie beim Boris-Pusher. Sie lautet

$$\frac{\vec{x}^{n+\frac{1}{2}} - \vec{x}^{n-\frac{1}{2}}}{\Delta t} = \vec{v}^n, \quad (2.28)$$

$$\frac{\vec{p}^{n+1} - \vec{p}^n}{\Delta t} = e \left(\vec{E}^{n+\frac{1}{2}} + \vec{v}^{n+\frac{1}{2}} \times \vec{B}^{n+\frac{1}{2}} \right). \quad (2.29)$$

Der Unterschied besteht in der Approximation von $\vec{v}^{n+\frac{1}{2}}$. Für den Vay-Pusher lautet diese

$$\vec{v}^{n+\frac{1}{2}} = \frac{\vec{v}^n + \vec{v}^{n+1}}{2}. \quad (2.30)$$

Es wird die Substitution

$$\vec{p}_\sim = \vec{p}^n + \Delta t e \left(\vec{E}^{n+\frac{1}{2}} + \frac{\vec{v}^n}{2} \times \vec{B}^{n+\frac{1}{2}} \right) \quad (2.31)$$

verwendet, um die implizite Gleichung

$$\vec{p}^{n+1} = \vec{p}_\sim + \frac{e\Delta t}{m_e} \left(\frac{\vec{p}^{n+1}}{2\gamma^{n+1}} \times \vec{B}^{n+\frac{1}{2}} \right) \quad (2.32)$$

zu erhalten. Der Lorentzfaktor γ^{n+1} ist wie üblich durch

$$\gamma^{n+1} = \sqrt{1 + \left| \frac{\vec{p}^{n+1}}{m_e c} \right|^2} \quad (2.33)$$

definiert. Die implizite Gleichung für \vec{p}^{n+1} kann explizit aufgelöst werden [28]. Man erhält

$$\gamma^{n+1} = \sqrt{\frac{\sigma + \sqrt{\sigma^2 + 4(\tau^2 + u^{*2})}}{2}}, \quad (2.34)$$

$$\vec{p}^{n+1} = s[\vec{p}_\sim + (\vec{p}_\sim \cdot \vec{t})\vec{t} + \vec{p}_\sim \times \vec{t}] \quad (2.35)$$

mit den Abkürzungen

$$\tau = \frac{e\Delta t}{m_e} \vec{B}^{n+\frac{1}{2}}, \quad (2.36)$$

$$u^* = \frac{\vec{p}_\sim \cdot \vec{\tau}}{m_e c}, \quad (2.37)$$

$$\sigma = \tilde{\gamma}^2 - |\vec{\tau}|^2, \quad (2.38)$$

$$\vec{t} = \frac{\vec{\tau}}{\gamma^{n+1}}, \quad (2.39)$$

$$s = 1/(1 + |\vec{t}|^2). \quad (2.40)$$

Als Letztes werden noch die Positionen \vec{x} zu ganzzahligen Zeitpunkten t^n definiert, um \vec{x} und \vec{p} zu gleichen Zeiten zu haben. Sie lauten

$$\vec{x}^n = \vec{x}^{n-\frac{1}{2}} + \frac{\Delta t}{2} \vec{v}^n = \vec{x}^{n+\frac{1}{2}} - \frac{\Delta t}{2} \vec{v}^n. \quad (2.41)$$

2.2.4 Nyström-Methode

Nyström-Verfahren [20] wurden speziell für die Integration von gewöhnlichen Differentialgleichungen zweiter Ordnung entwickelt. Sie sind ganz allgemein auf Bewegungsgleichungen der Form

$$\frac{dx^\mu}{ds} = u^\mu, \quad \frac{du^\mu}{ds} = f^\mu(x^\nu, u^\nu) \quad (2.42)$$

anwendbar. Für die Integration dieser Bewegungsgleichungen wird das folgende Schema verwendet

$$x^{\mu 1} = x^{\mu 0} + \Delta s u^{\mu 0} + \frac{\Delta s^2}{6} (k_1^\mu + k_2^\mu + k_3^\mu), \quad (2.43)$$

$$u^{\mu 1} = u^{\mu 0} + \frac{\Delta s}{6} (k_1^\mu + 2k_2^\mu + 2k_3^\mu + k_4^\mu), \quad (2.44)$$

wobei

$$k_1^\mu = f^\mu(x^{\nu 0}, u^{\nu 0}), \quad (2.45)$$

$$k_2^\mu = f^\mu\left(x^{\nu 0} + \frac{\Delta s}{2} u^{\nu 0} + \frac{\Delta s^2}{8} k_1^\nu, u^{\nu 0} + \frac{\Delta s}{2} k_1^\nu\right), \quad (2.46)$$

$$k_3^\mu = f^\mu\left(x^{\nu 0} + \frac{\Delta s}{2} u^{\nu 0} + \frac{\Delta s^2}{8} k_1^\nu, u^{\nu 0} + \frac{\Delta s}{2} k_2^\nu\right), \quad (2.47)$$

$$k_4^\mu = f^\mu\left(x^{\nu 0} + \Delta s u^{\nu 0} + \frac{\Delta s^2}{2} k_3^\nu, u^{\nu 0} + \Delta s k_3^\nu\right). \quad (2.48)$$

Die Konvergenzordnung dieses Verfahrens beträgt vier, wie im Abschnitt 2.2.5 allgemein erläutert.

2.2.5 Verallgemeinerte Nyström-Integratoren

Das zuvor beschriebene Nyström-Verfahren kann verallgemeinert werden. Das allgemeine Nyström-Verfahren zur Berechnung der Approximation $x^{\mu 1}$ für $x^\mu(s^0 + \Delta s)$ ausgehend von den Startwerten $x^\mu(s^0) = x^{\mu 0}$ und $u^\mu(s^0) =$

$u^{\mu 0}$ lautet

$$x^{\mu 1} = x^{\mu 0} + \Delta s u^{\mu 0} + \Delta s^2 \sum_{i=1}^S \bar{b}_i k_i^{\mu}, \quad (2.49)$$

$$u^{\mu 1} = u^{\mu 0} + \Delta s \sum_{i=1}^S b_i k_i^{\mu}, \quad (2.50)$$

$$k_i^{\mu} = f^{\mu} \left(x^{\nu 0} + c_i \Delta s u^{\mu 0} + \Delta s^2 \sum_{j=1}^S \bar{a}_{ij} k_j^{\nu}, u^{\nu 0} + \Delta s \sum_{j=1}^S a_{ij} k_j^{\nu} \right). \quad (2.51)$$

Die Parameter a_{ij} , \bar{a}_{ij} , b_i , \bar{b}_i und c_i sind abhängig vom jeweils zu lösenden Problem so zu wählen, dass eine gewünschte Konvergenzordnung erreicht wird und sich das System (2.49)-(2.51) in vertretbarem Aufwand lösen lässt. Je nach Anwendungsfall sind möglicherweise noch weitere Bedingungen an die Parameter zu stellen, worauf an dieser Stelle jedoch nicht genauer eingegangen werden soll. Die Zahl S wird als Stufe des Verfahrens bezeichnet. Die berechneten Werte $x^{\mu 1}$ und $u^{\mu 1}$ werden als Startwerte für die nächste Iteration verwendet.

Handelt es sich bei den Matrizen a_{ij} und \bar{a}_{ij} um linke untere Dreiecksmatrizen, oder können diese durch synchrone Vertauschung von Zeilen auf diese Form gebracht werden, dann können die k_i sukzessive direkt durch Einsetzen berechnet werden. Ein solches Verfahren wird als *explizit* bezeichnet. Andernfalls wird ein Verfahren als *implizit* bezeichnet. Im Folgenden wird aufgezeigt, welche Bedingungen die Parameter erfüllen müssen, damit das Verfahren von einer bestimmten Konvergenzordnung p ist.

Ein numerisches Verfahren ist von der Konvergenzordnung p , wenn sich die Konsistenzfehler

$$\varepsilon_x^{\mu}(x^{\nu 0}, u^{\nu 0}, \Delta s) = x^{\mu}(s^1) - x^{\mu 1}, \quad (2.52)$$

$$\varepsilon_u^{\mu}(x^{\nu 0}, u^{\nu 0}, \Delta s) = u^{\mu}(s^1) - u^{\mu 1} \quad (2.53)$$

asymptotisch wie Δs^{p+1} verhalten [4, 9]. Um das asymptotische Verhalten von ε_x^{μ} und ε_u^{μ} zu bestimmen, werden die exakten Lösungen $x^{\mu}(s^1)$ und $u^{\mu}(s^1)$, sowie die numerischen Approximationen $x^{\mu 1}$ und $u^{\mu 1}$ in Potenzen von Δs entwickelt. Aus dieser Entwicklung lässt sich das asymptotische Verhalten von ε_x^{μ} und ε_u^{μ} direkt ablesen.

Zunächst soll die Taylor-Entwicklung der exakten Lösungen $x^{\mu}(s^1)$ und

$u^\mu(s^1)$ betrachtet werden. Sie lauten

$$x^\mu(s^1) = x^{\mu 0} + \Delta s \dot{x}^{\mu 0} + \frac{1}{2} \Delta s^2 \ddot{x}^{\mu 0} + \frac{1}{6} \Delta s^3 \dddot{x}^{\mu 0} + \dots, \quad (2.54)$$

$$u^\mu(s^1) = u^{\mu 0} + \Delta s \dot{u}^{\mu 0} + \frac{1}{2} \Delta s^2 \ddot{u}^{\mu 0} + \frac{1}{6} \Delta s^3 \dddot{u}^{\mu 0} + \dots. \quad (2.55)$$

Für die Ableitungen von $x^{\mu 0}$ und $u^{\mu 0}$ ergeben sich die folgenden Ausdrücke

$$\dot{x}^{\mu 0} = u^{\mu 0}, \quad (2.56)$$

$$\ddot{x}^{\mu 0} = \dot{u}^{\mu 0} = f^\mu(x^{\nu 0}, u^{\nu 0}), \quad (2.57)$$

$$\ddot{\dot{x}}^{\mu 0} = \ddot{u}^{\mu 0} = \partial_\mu^x f^\nu(x^{\xi 0}, u^{\xi 0}) u^{\mu 0} + \partial_\nu^u f^\nu(x^{\xi 0}, u^{\xi 0}) f^\mu(x^{\xi 0}, u^{\xi 0}), \quad (2.58)$$

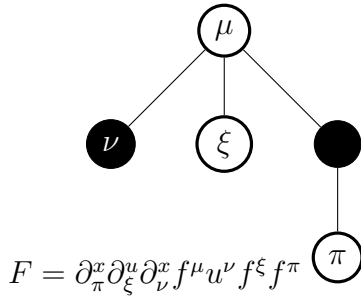
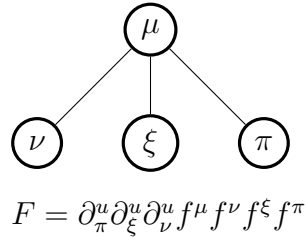
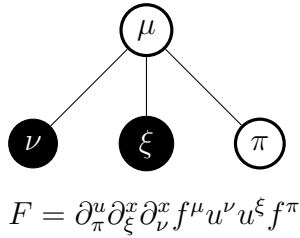
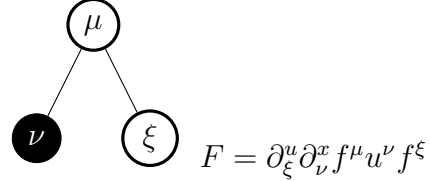
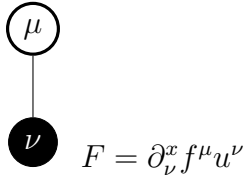
$$\begin{aligned} \ddot{\dot{u}}^{\mu 0} = & (\partial_\nu^x \partial_\xi^u f^\xi(x^{\pi 0}, u^{\pi 0}) u^{\nu 0} + \partial_\nu^u \partial_\xi^x f^\xi(x^{\pi 0}, u^{\pi 0}) f^\nu(x^{\pi 0}, u^{\pi 0})) u^{\mu 0} + \\ & + \partial_\nu^x f^\nu(x^{\xi 0}, u^{\xi 0}) f^\mu(x^{\xi 0}, u^{\xi 0}) + \\ & + (\partial_\nu^x \partial_\xi^u f^\xi(x^{\pi 0}, u^{\pi 0}) u^{\nu 0} \\ & + \partial_\nu^u \partial_\xi^x f^\xi(x^{\pi 0}, u^{\pi 0}) f^\nu(x^{\xi 0}, u^{\xi 0})) f^\mu(x^{\xi 0}, u^{\xi 0}) + \\ & + \partial_\xi^u f^\xi(x^{\pi 0}, u^{\pi 0}) (\partial_\nu^x f^\nu(x^{\pi 0}, u^{\pi 0}) u^{\mu 0} \\ & + \partial_\nu^u f^\nu(x^{\pi 0}, u^{\pi 0}) f^\mu(x^{\pi 0}, u^{\pi 0})), \\ \ddot{\dot{u}}^{\mu 0} = & \dots \end{aligned} \quad (2.60)$$

Wie man erkennen kann, werden die Ausdrücke für hohe Ableitungen sehr schnell sehr unübersichtlich. Deshalb ist es üblich, eine graphische Notation für die einzelnen Terme einzuführen [9]. Hierfür wird die Menge LNT der markierten zweifarbigen Bäume definiert. Die Bäume haben schwarze und weiße Knoten, wobei der Wurzelknoten immer weiß ist. Zudem gilt die Einschränkung, dass ein schwarzer Knoten höchstens einen Nachfolger haben kann und dieser dann weiß sein muss. Jeder Knoten im Baum ist mit einem Label μ, ν, ξ, \dots versehen. Jeder dieser Bäume t repräsentiert einen Term der rechten Seiten von Gleichungen (2.56)-(2.60). Dieser Term wird mit $F(t)$ bezeichnet und wird zu einem gegebenen Baum t wie folgt konstruiert:

- Jeder *weiße* Knoten ξ ergibt den Term f^ξ .
- Jeder *weiße* Knoten ξ mit *weißem* Vorgängerknoten ν ergibt zudem eine Ableitung ∂_ξ^u am Term f^ν .

- Jeder *weiße* Knoten ξ mit *schwarzem* Vorgängerknoten, der wiederum einen *weißen* Vorgängerknoten ν hat, ergibt eine Ableitung ∂_ξ^x am Term f^ν .
- Jeder *schwarze* Endknoten ξ ergibt den Term u^ξ , sowie eine Ableitung ∂_ξ^x am Term f^ν seines weißen Vorgängerknotens ν .

Die Konstruktion des Terms F soll anhand einiger Beispiele verdeutlicht werden.



$LNT_\mu(q)$ bezeichnet die Menge der markierten Bäume mit insgesamt q Knoten und Wurzel μ . Die Menge $NT_\mu(q)$ sind die Äquivalenzklassen der Elemente aus $LNT_\mu(q)$. Äquivalente Bäume unterscheiden sich nur durch eine Permutation der Labels. Die Anzahl der Bäume in einer Äquivalenzklasse

$t \in NT_\mu(q)$ wird mit $\alpha(t)$ bezeichnet. Die q -te Ableitung von u^μ kann mit

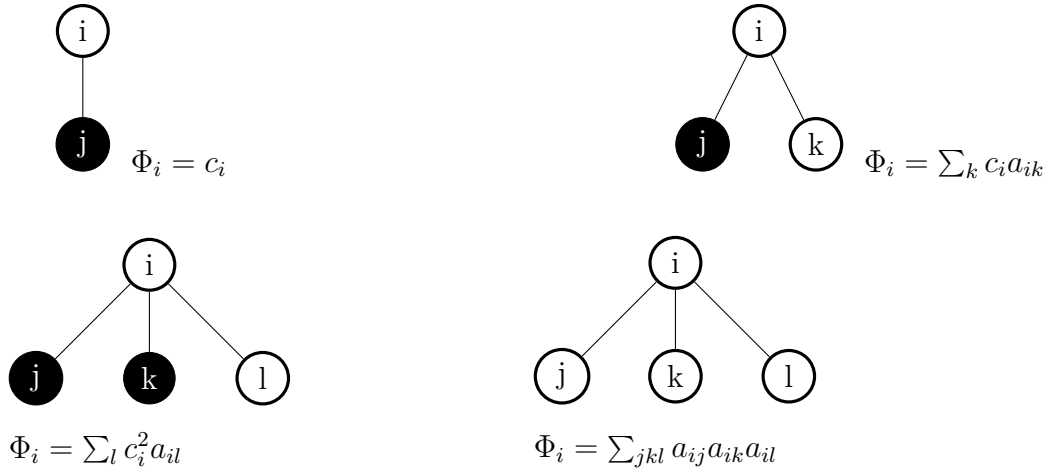
$$u^{\mu(q)} = \sum_{t \in LNT_\mu(q)} F(t)(x^\nu, u^\nu) = \sum_{t \in NT_\mu(q)} \alpha(t) F(t)(x^\nu, u^\nu) \quad (2.61)$$

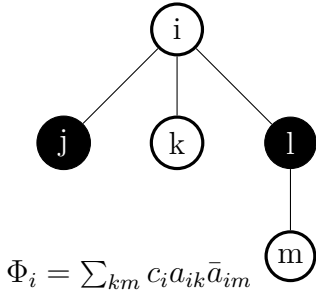
berechnet werden.

Für die Entwicklung der numerischen Lösungen x^{μ^1} und u^{μ^1} nach Potenzen von Δs werden deren Ableitungen benötigt. Für diese gibt es ebenfalls eine graphische Notation in Form der Bäume $LNT_i(q)$. Um die Ableitungsterme aus den Bäumen zu konstruieren, wird zunächst zu einem Baum $t \in LNT_i(q)$ der Ausdruck $\Phi_i(t)$ definiert. Letzterer ist die Summe über alle Labels an *weißen* Knoten (außer der Wurzel i) über die folgenden Terme:

- a_{kl} für einen *weißen* Knoten k mit einen *weißen* Nachfolger l .
- \bar{a}_{kl} für einen *weißen* Knoten k , der über einen *schwarzen* Nachfolger mit einem *weißen* Knoten l verbunden ist.
- c_k^m für einen *weißen* Knoten k , der eine Anzahl von m *schwarzer Endknoten* als Nachfolger hat.

Auch diese Konstruktion soll an einigen Beispielen demonstriert werden.





Des Weiteren wird für jeden Baum t der Wert $\gamma(t)$ rekursiv definiert. Die Definition lautet

$$\gamma(t) = \begin{cases} 1 & \text{wenn } |t| = 1 \\ |t| \cdot \gamma(\tau_1) \cdot \dots \cdot \gamma(t_m) & \text{wenn } t = [t_1, \dots, t_m] \end{cases}. \quad (2.62)$$

Hierbei sind t_1 bis t_m die Bäume, welche aus t entstehen, wenn die Wurzel weggelassen wird und $|t|$ ist die Anzahl der Knoten im Baum t . Die Ableitungen der numerischen Lösungen $x^{\mu 1}$ und $u^{\mu 1}$ lassen sich folgendermaßen schreiben

$$x_1^{\mu(q)} \Big|_{h=0} = q \sum_{t \in LNT_\mu(q-1)} \gamma(t) \sum_{i=1}^s \bar{b}_i \Phi_i(t) F(t)(x^{\nu 0}, u^{\nu 0}), \quad (2.63)$$

$$u_1^{\mu(q)} \Big|_{h=0} = \sum_{t \in LNT_\mu(q)} \gamma(t) \sum_{i=1}^s b_i \Phi_i(t) F(t)(x^{\nu 0}, u^{\nu 0}). \quad (2.64)$$

Aus (2.61) und (2.64) kann direkt abgelesen werden, bis zu welcher Ordnung in Δs die numerischen Lösungen $x^{\mu 1}$ und $u^{\mu 1}$ mit den exakten Lösungen $x^\mu(s^1)$ und $u^\mu(s^1)$ übereinstimmen. Hieraus lässt sich auf die Konvergenzordnung des Verfahrens schließen. Insgesamt müssen die folgenden Bedingungen erfüllt sein, damit das Verfahren von der Konvergenzordnung p ist

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^s b_i \Phi_i(t) &= \frac{1}{\gamma(t)} \quad , \quad \forall |t| \leq p, \\ \sum_{i=1}^s \bar{b}_i \Phi_i(t) &= \frac{1}{(|t|+1)\gamma(t)} \quad , \quad \forall |t| \leq p-1. \end{aligned} \quad (2.65)$$

Mit Hilfe der Bedingungen (2.65) kann leicht nachgewiesen werden, dass das in Abschnitt 2.2.4 vorgestellte ursprüngliche Nyström-Verfahren aus Gleichungen (2.43)-(2.48) von der Konvergenzordnung vier ist. Es ist üblich, die Parameter a_{ij} , \bar{a}_{ij} , b_i , \bar{b}_i und c_i in Form eines *Butcher-Tableaus* darzustellen. In Tabelle 2.1 ist das Butcher-Tableau für das ursprüngliche Nyström-Verfahren dargestellt.

c_i	\bar{a}_{ij}				a_{ij}			
	0	1/2	1/2	1	0	1/2	1/2	1
0	0	0	0	0	0	0	0	0
1/2	1/8	0	0	0	1/2	0	0	0
1/2	1/8	0	0	0	0	1/2	0	0
1	0	0	1/2	0	0	0	1	0
	1/6	1/6	1/6	0	1/6	1/3	1/3	1/6
	\bar{b}_i				b_i			

Tabelle 2.1: Butcher-Tableau des ursprünglichen Nyström-Verfahrens (4. Ordnung). Schematische Darstellung der Parameter a_{ij} , \bar{a}_{ij} , b_i , \bar{b}_i und c_i aus Gleichungen (2.49)-(2.51).

2.2.6 Adaptive Schrittweitenregelung

Nun soll der Frage nachgegangen werden, welche Schrittweite Δs für einen Integrationsschritt am geeignetsten ist. Es ist zu erwarten, dass sich die optimale zu wählende Schrittweite im Laufe der Simulation ändert. Um ein Teilchen, auf welches fast keine Kraft wirkt, zu propagieren, kann eine relativ große Schrittweite gewählt werden, ohne dass der numerische Fehler allzu groß wird. Wenn dasselbe Teilchen sich im weiteren Verlauf der Simulation in einen Bereich bewegt, in dem große Kräfte auf das Teilchen wirken und es somit sehr starken Beschleunigungen ausgesetzt ist, führt eine zu groß gewählte Schrittweite sehr schnell zu großen numerischen Fehlern. Prinzipiell gilt natürlich, je kleiner die Schrittweite gewählt wird, desto genauer ist die Approximation. Dies geht jedoch mit einem höheren Rechenaufwand einher, da eine größere Anzahl an Schritten berechnet werden muss, um die gleiche Zeitspanne zu simulieren. Da die zur Verfügung stehende Rechenleistung jedoch begrenzt ist, ist es klug, einen relativ großen Zeitschritt zu verwenden, solange dieser nur einen kleinen numerischen Fehler erzeugt. Die eingesparte Rechenzeit kann sinnvoll genutzt werden, um an kritischen Stellen in der Simulation sehr kleine Zeitschritte zu verwenden.

Jeder Integrationsschritt erzeugt einen *lokalen* Approximationsfehler

$$\varepsilon(\Delta s) = \left| x^{\mu 1}(\Delta s) - x^{\mu}(s^0 + \Delta s) \right|, \quad (2.66)$$

welcher von der Schrittweite Δs abhängt und im Allgemeinen mit dieser anwächst. Bei der adaptiven Integration wird eine Toleranzgrenze für diesen Fehler vorgegeben und die Schrittweite in jedem Integrationsschritt so

gewählt, dass sie möglichst groß ist und der Fehler noch innerhalb der Toleranzgrenzen liegt. Ist die verwendete Integrationsmethode von der Ordnung p , so kann der Fehler ε durch

$$\varepsilon(\Delta s) = C\Delta s^{p+1} + \mathcal{O}(\Delta s^{p+2}) \approx C\Delta s^{p+1} \quad (2.67)$$

abgeschätzt werden. Hierbei ist C eine *unbekannte* Konstante. Da der Fehler für die optimale Schrittweite gerade so groß wie die Toleranz TOL sein soll, kann die optimale Schrittweite Δs^* durch

$$\Delta s^* = \sqrt[p+1]{\frac{\text{TOL}}{\varepsilon(\Delta s)}} \Delta s \approx \sqrt[p+1]{\frac{\text{TOL}}{C}} \quad (2.68)$$

abgeschätzt werden. Eine direkte Berechnung von Δs^* nach Gleichung (2.68) ist jedoch nicht möglich, da hierfür der Fehler $\varepsilon(\Delta s)$ bekannt sein müsste. Aus diesem Grund wird eine Approximation $\tilde{\varepsilon}$ für den Fehler ε verwendet. Eine solche Approximation erhält man, indem der Integrationsschritt ein zweites Mal mit einem anderen numerischen Verfahren von höherer Ordnung berechnet wird. Das Ergebnis der zweiten Berechnung des Integrationsschrittes mit einem genaueren Verfahren wird mit \tilde{x}^{μ^1} bezeichnet. Dieser Wert wird mit dem zuvor berechneten Wert x^{μ^1} verglichen. Dies ergibt die Approximation

$$\tilde{\varepsilon}(\Delta s) = x^{\mu^1}(\Delta s) - \tilde{x}^{\mu^1}(\Delta s). \quad (2.69)$$

Wenn die Werte x^{μ^1} und \tilde{x}^{μ^1} mit zwei verschiedenen Nyström-Verfahren berechnet werden, kann einiges an Rechenaufwand eingespart werden, wenn die beiden Verfahren die Parameter a_{ij} , \bar{a}_{ij} und c_i gemeinsam haben, da die k_i aus Gleichung (2.51) dann nur einmal berechnet werden müssen. Ein solches Verfahren wird als *eingebettetes* Verfahren bezeichnet. Die beiden Verfahren unterscheiden sich nur in den Parametern b_i und \tilde{b}_i . Verfahren dieser Art können mit den in Abschnitt 2.2.5 aufgezeigten Ordnungsbedingungen konstruiert werden. Fehlberg [8] konstruierte ein solches Verfahren der Ordnungen 5(6). Hierbei werden in einer ersten Berechnung die Werte x^{μ^1} und u^{μ^1} mit einem Verfahren fünfter Ordnung berechnet und in einer zweiten Berechnung der Wert \tilde{x}^{μ^1} mit einem Verfahren sechster Ordnung. Die Parameter sind in Tabelle 2.2 aufgelistet. Das Verfahren mit den Parametern a_{ij} , \bar{a}_{ij} , b_i , \tilde{b}_i und c_i ist von der Ordnung 5. Werden anstelle der Parameter b_i die Parameter \tilde{b}_i verwendet, so ist es von der Ordnung 6. Dieser Wert wird verwendet, um den lokalen Approximationsfehler ε abzuschätzen.

	\bar{a}_{ij}										a_{ij}									
c_i	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
$\frac{4}{15}$	$\frac{8}{225}$	0	0	0	0	0	0	0	0	0	$\frac{4}{15}$	0	0	0	0	0	0	0	0	0
$\frac{2}{5}$	$\frac{1}{25}$	$\frac{1}{25}$	0	0	0	0	0	0	0	0	$\frac{1}{10}$	$\frac{3}{10}$	0	0	0	0	0	0	0	0
$\frac{3}{5}$	$\frac{9}{160}$	$\frac{81}{800}$	$\frac{9}{400}$	0	0	0	0	0	0	0	$\frac{3}{20}$	0	$\frac{9}{20}$	0	0	0	0	0	0	0
$\frac{9}{10}$	$\frac{81}{640}$	0	$\frac{729}{3200}$	$\frac{81}{1600}$	0	0	0	0	0	0	$\frac{9}{40}$	0	0	$\frac{27}{40}$	0	0	0	0	0	0
$\frac{3}{4}$	$\frac{11283}{88064}$	0	$\frac{3159}{88064}$	$\frac{7275}{44032}$	$-\frac{33}{688}$	0	0	0	0	0	$\frac{11}{48}$	0	0	$\frac{5}{8}$	$-\frac{5}{48}$	0	0	0	0	0
$\frac{2}{7}$	$\frac{6250}{194481}$	0	0	0	$-\frac{194481}{1047925}$	$\frac{1696}{64827}$	0	0	0	0	$\frac{27112}{194481}$	0	0	$\frac{56450}{64827}$	$\frac{80000}{194481}$	$-\frac{24544}{21609}$	0	0	0	0
1	$-\frac{6706}{45279}$	0	0	0	$\frac{1047925}{1946997}$	$-\frac{147544}{196209}$	$\frac{1615873}{1874886}$	0	0	0	$-\frac{26033}{41796}$	0	0	$-\frac{236575}{38313}$	$-\frac{14500}{10449}$	$\frac{275936}{45279}$	$\frac{228095}{73788}$	0	0	0
1	$\frac{31}{360}$	0	0	0	0	$\frac{64}{585}$	$\frac{2401}{7800}$	$-\frac{1}{300}$	0	0	$\frac{7}{81}$	0	0	0	$-\frac{250}{3483}$	$\frac{160}{351}$	$\frac{2401}{5590}$	$\frac{1}{10}$	0	0
$\bar{b}_i \rightarrow$	$\frac{31}{360}$	0	0	0	0	$\frac{64}{585}$	$\frac{2401}{7800}$	$-\frac{1}{300}$	0	0	$\frac{7}{81}$	0	0	0	$-\frac{250}{3483}$	$\frac{160}{351}$	$\frac{2401}{5590}$	$\frac{1}{10}$	0	0
$\tilde{b}_i \rightarrow$	$\frac{31}{360}$	0	0	0	0	$\frac{64}{585}$	$\frac{2401}{7800}$	0	$-\frac{1}{300}$	0					b_i					

Tabelle 2.2: Butcher-Tableau für ein eingebettetes Nyström-Verfahren der Ordnung 5(6). Schematische Darstellung der Parameter a_{ij} , \bar{a}_{ij} , b_i , \bar{b}_i und c_i aus Gleichungen (2.49)-(2.51). Um $\tilde{x}^{\mu 1}$ zu berechnen, werden die Parameter \bar{b}_i durch die Parameter \tilde{b}_i ersetzt.

Wenn der Fehler kleiner als eine vorgegebene Toleranz ist, so wird das Ergebnis $x^{\mu 1}$ und $u^{\mu 1}$ akzeptiert. Ansonsten wird der Integrationsschritt mit einer kleineren Schrittweite wiederholt, solange bis die vorgegebenen Toleranzgrenzen eingehalten werden. Zudem wird nach jedem Integrationsschritt eine empfohlene Schrittweite nach (2.68) berechnet und zur Sicherheit noch mit einem Faktor kleiner eins multipliziert. Diese Schrittweite wird dann für den ersten Versuch des folgenden Iterationsschrittes verwendet.

Um die adaptive Schrittweitenregelung zu demonstrieren, wird die Streuung eines Protons an einem Deuterium-Kern simuliert. In Abbildung 2.1a sind die Trajektorien der beiden Streuteilchen aufgezeigt. Abbildung 2.1b zeigt die in der Simulation verwendeten Schrittweiten Δs für die beiden Teilchen in Abhängigkeit von der Zeit t . Es ist zu erkennen, dass die Schrittweite Δs in der Simulation zur Zeit $t \approx 102$ durch die adaptive Schrittweitenregelung drastisch reduziert wird. Dies ist genau der Zeitpunkt, zu dem die beiden Teilchen aneinander streuen. Die auf die beiden Teilchen wirkenden Kräfte sind zu diesem Zeitpunkt besonders groß, weshalb hier eine sehr kleine Schrittweite Δs nötig ist, um den lokalen Approximationsfehler kleiner als die vorgegebene Toleranz zu halten.

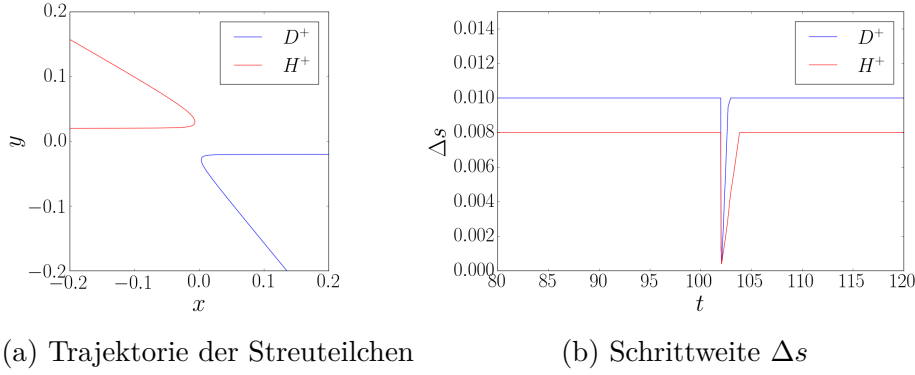


Abbildung 2.1: Streuung $H^+ D^+$. Längen in Einheiten von $e^2/(4\pi\epsilon_0 m_e c^2) = 2.82 \cdot 10^{-15}\text{m}$, Zeiten in Einheiten von $e^2/(4\pi\epsilon_0 m_e c^3) = 9.40 \cdot 10^{-24}\text{s}$.

2.3 Vergleich der vorgestellten Verfahren

Nun sollen die Konvergenzen der vorgestellten numerischen Verfahren explizit anhand einer Beispielsimulation miteinander verglichen werden. Als Beispiel wird ein einzelnes geladenes Teilchen in einer ebenen elektromagnetischen Welle betrachtet. Zudem wird die Strahlungsdämpfung vernachlässigt und deshalb in Gleichung (2.2) $g^\mu = 0$ gesetzt. Die exakte analytische Lösung der Trajektorie $x^\mu(s)$ des Teilchens ist in diesem Fall bekannt [13]. Sie lautet

$$t = s + \frac{1}{4} \left(s - \frac{\sin(2s)}{2} \right), \quad (2.70)$$

$$x = \frac{1}{4} \left(s - \frac{\sin(2s)}{2} \right), \quad (2.71)$$

$$y = 1 - \cos(s), \quad (2.72)$$

$$z = 0. \quad (2.73)$$

Hierbei wurden die Normierung und die Anfangsbedingungen gezielt so gewählt, dass die Gleichung für die Trajektorie $x^\mu(s)$ eine möglichst einfache Form annimmt. Da ein analytischer Ausdruck für die Trajektorie vorliegt, kann der numerische Fehler einer Simulation exakt angegeben werden. In Abbildung 2.2 ist der numerische Fehler ε einer Simulation in Abhängigkeit der verwendeten Schrittweite Δs für einen Teil der hier diskutierten Integrationsverfahren aufgezeigt. Die Simulationen wurden jeweils bis zu der Laborzeit $t = 100$ durchgeführt. Die Konvergenzgeschwindigkeit der Verfahren

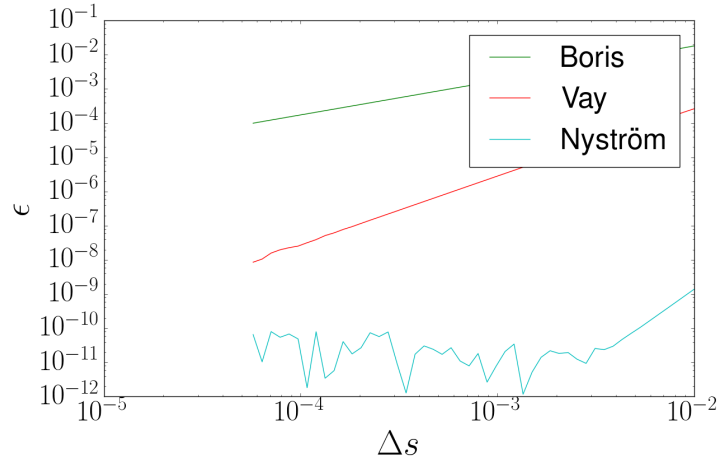


Abbildung 2.2: Zeigt die Konvergenz der beschriebenen Verfahren. Das Fehlermaß ϵ ist die euklidische Distanz der numerischen und analytischen Teilchenpositionen am Ende der Simulation bei $t = 100$.

kann aus Abbildung 2.2 abgelesen werden.

2.4 Interpolation der Trajektorien

Die vorgestellten Integrationsmethoden berechnen die numerischen Approximationen für x^μ und u^μ nur an diskreten Zeitpunkten s^n . Um die Felder nach Gleichung (2.5) und (2.6) berechnen zu können, werden jedoch im Allgemeinen kontinuierliche Trajektorien der Teilchen benötigt. Um aus den diskreten Daten kontinuierliche Trajektorien zu erhalten, werden die Trajektorien stückweise polynomial interpoliert. Es werden drei mögliche Interpolationen vorgestellt.

Als Erstes wird die lineare Interpolation vorgestellt. Es soll angenommen werden, dass die numerische Integration die Punkte $x^{\mu 0}$ und $x^{\mu 1}$ der Trajektorie liefert, wobei sich der Punkt $x^{\mu 0}$ innerhalb und der Punkt $x^{\mu 1}$ außerhalb des Rückwärtslichtkegels des Beobachtungspunktes x^μ befinden. Um die Felder nach (2.5) und (2.6) zu berechnen wird der Schnittpunkt der Trajektorie mit dem Lichtkegel benötigt. Um diesen Schnittpunkt zu bestimmen wird die Teilchenbahn zwischen den beiden bekannten Punkten $x^{\mu 0}$ und $x^{\mu 1}$ linear interpoliert. Der Schnittpunkt lässt sich damit als Konvexkombination

von $x^{\mu 0}$ und $x^{\mu 1}$ darstellen

$$x_c^\mu = \lambda x^{\mu 0} + (1 - \lambda) x^{\mu 1}. \quad (2.74)$$

Der Schnittpunkt x_c^μ mit dem Lichtkegel von x^μ muss die Bedingung

$$(x_c - x)_\mu (x_c - x)^\mu = 0 \quad (2.75)$$

erfüllen. Mit dieser Bedingung erhält man aus Gleichung (2.74) eine quadratische Gleichung für den Parameter λ . Sie lautet

$$\begin{aligned} \lambda^2 (x^0 - x^1)_\mu (x^0 - x^1)^\mu + 2\lambda (x^0 - x^1)_\mu (x^1 - x)^\mu \\ + (x_\mu^1 x^{\mu 1} + x_\mu x^\mu - 2x_\mu^1 x^\mu) = 0. \end{aligned} \quad (2.76)$$

Diese quadratische Gleichung hat im Allgemeinen *zwei* Lösungen für λ . Eine Lösung bestimmt den Schnittpunkt mit dem Rückwärtslichtkegel, die andere den Schnittpunkt mit dem Vorwärtslichtkegel. An dieser Stelle ist nur der Schnittpunkt mit dem Rückwärtslichtkegel von Interesse. Dies ist, wie aus Gleichung (2.74) ersichtlich, die größere der beiden Lösungen

$$\lambda = \frac{-b + \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a}. \quad (2.77)$$

Hierbei wurden die Substitutionen

$$a = (x^0 - x^1)_\mu (x^0 - x^1)^\mu, \quad (2.78)$$

$$b = 2(x^0 - x^1)_\mu (x^1 - x)^\mu, \quad (2.79)$$

$$c = x_\mu^1 x^{\mu 1} + x_\mu x^\mu - 2x_\mu^1 x^\mu \quad (2.80)$$

verwendet. Der Schnittpunkt kann durch Einsetzen von λ in Gleichung (2.74) bestimmt werden.

Nun soll ein Polynom dritter Ordnung zur Interpolation vorgestellt werden. Um die Gleichungen einfach zu halten, soll angenommen werden, dass die Trajektorie zwischen den Zeitpunkten $s^0 = 0$ und $s^1 = 1$ interpoliert werden muss. Die Werte für x^μ und u^μ zu diesen beiden Zeitpunkten werden mit $x^{\mu 0}$, $u^{\mu 0}$, $x^{\mu 1}$ und $u^{\mu 1}$ bezeichnet. Für $s \in [s^0, s^1]$ soll die Interpolation

$$x^\mu(s) = s^3 A^\mu + s^2 B^\mu + s C^\mu + D^\mu, \quad (2.81)$$

$$u^\mu(s) = 3s^2 A^\mu + 2s B^\mu + C^\mu, \quad (2.82)$$

$$a^\mu(s) = 6s A^\mu + 2B^\mu \quad (2.83)$$

verwendet werden. Die Koeffizienten werden eindeutig durch die Bedingungen $x^\mu(0) = x^{\mu 0}$, $u^\mu(0) = u^{\mu 0}$, $x^\mu(1) = x^{\mu 1}$ und $u^\mu(1) = u^{\mu 1}$ bestimmt. Sie lauten

$$A^\mu = 2x^{\mu 0} + u_0^\mu - 2x^{\mu 1} + u^{\mu 1}, \quad (2.84)$$

$$B^\mu = -3x^{\mu 0} - 2u_0^\mu + 3x^{\mu 1} - u^{\mu 1}, \quad (2.85)$$

$$C^\mu = u_0^\mu, \quad (2.86)$$

$$D^\mu = x^{\mu 0}. \quad (2.87)$$

Für den Fall, dass die Interpolation zwischen zwei anderen Zeitpunkten als $s^0 = 0$ und $s^1 = 1$ berechnet werden soll, muss die Interpolation entsprechend verschoben und skaliert werden.

Falls neben den Positionen $x^{\mu n}$ und den Geschwindigkeiten $u^{\mu n}$ auch die jeweiligen Beschleunigungen $a^{\mu n}$ der Teilchen zu den Zeitpunkten s^n gespeichert werden, so kann zwischen zwei Zeitpunkten ein Polynom fünfter Ordnung zur Interpolation verwendet werden. Um die Formeln einfach zu halten, wird wieder davon ausgegangen, dass die Werte zwischen den Zeitpunkten $s^0 = 0$ und $s^1 = 1$ zu interpolieren sind. Die entsprechenden Werte an diesen Zeitpunkten werden mit $x^{\mu 0}$, u_0^μ , a_0^μ und $x^{\mu 1}$, u_1^μ , a_1^μ bezeichnet. Für $s \in [s^0, s^1]$ wird die Interpolation

$$x^\mu(s) = s^5 A^\mu + s^4 B^\mu + s^3 C^\mu + s^2 D^\mu + s E^\mu + F^\mu, \quad (2.88)$$

$$u^\mu(s) = 5s^4 A^\mu + 4s^3 B^\mu + 3s^2 C^\mu + 2s D^\mu + E^\mu, \quad (2.89)$$

$$a^\mu(s) = 20s^3 A^\mu + 12s^2 B^\mu + 6s C^\mu + 2D^\mu \quad (2.90)$$

verwendet. Die Koeffizienten lassen sich eindeutig aus den Randbedingungen $x^\mu(0) = x^{\mu 0}$, $u^\mu(0) = u_0^\mu$, $a^\mu(0) = a_0^\mu$, $x^\mu(1) = x^{\mu 1}$, $u^\mu(1) = u_1^\mu$, $a^\mu(1) = a_1^\mu$ bestimmen. Sie lauten

$$A^\mu = -6x^{\mu 0} - 3u_0^\mu - \frac{1}{2}a_0^\mu + 6x^{\mu 1} - 3u_1^\mu + \frac{1}{2}a_1^\mu, \quad (2.91)$$

$$B^\mu = 15x^{\mu 0} + 8u_0^\mu + \frac{3}{2}a_0^\mu - 15x^{\mu 1} + 7u_1^\mu - a_1^\mu, \quad (2.92)$$

$$C^\mu = -10x^{\mu 0} - 6u_0^\mu - \frac{3}{2}a_0^\mu + 10x^{\mu 1} - 4u_1^\mu + \frac{1}{2}a_1^\mu, \quad (2.93)$$

$$D^\mu = \frac{1}{2}a_0^\mu, \quad (2.94)$$

$$E^\mu = u_0^\mu, \quad (2.95)$$

$$F^\mu = x^{\mu 0}. \quad (2.96)$$

2.5 Setup und Umgang mit Singularitäten

Wie anhand der Liénard-Wiechert-Felder (2.5) und (2.6) ersichtlich ist, sind diese am Ort des erzeugenden Teilchens singular. Es ist daher zu befürchten, dass diese Singularitäten sowohl beim Setup als auch im Verlauf einer Simulation zu Problemen führen. Dieser Abschnitt widmet sich dem Problem der Singularitäten. Dazu werden zwei Beispiele analysiert. Zum einen anfänglich an Atome gebundene Elektronen zum anderen ein Elektron-Positron-System.

2.5.1 Neutrale Atome

Eine Möglichkeit, ein neutrales Plasma aufzusetzen, besteht darin, Elektronen in effektiven Ionenpotentialen zu binden. Im vorliegenden Fall wollen sollen unbewegliche Ionen betrachtet werden. Ein gefangenes Elektron kann durch ein äußeres Feld aus dem Potentialtopf des Ions geschleudert werden. In der Folge ionisiert das vormalig neutrale Atom. Durch die Wahl der Tiefe des Potentialtopfes kann die Ionisierungsenergie festgelegt werden. Im Folgenden soll eine mögliche Form des Potentialtopfs ermittelt werden.

Das gesuchte Potential ϕ_{Ion} der Ionen soll nur vom Abstand R vom Zentrum des Ions abhängen. Für Abstände $R > R_{\text{Ion}}$ soll es mit dem Potential eines Punktteilchens übereinstimmen und bei $R = 0$ die maximale Bindungsenergie ε_b annehmen. Es soll angenommen werden, dass die Polarisation bei kleinen externen Feldern linear vom anliegenden Feld abhängt. Das Potential hat somit für kleine Abstände $R < R_{\text{Ion}}$ eine Parabelform. Insgesamt soll das Potential die folgende Form annehmen

$$\phi_{\text{Ion}}(R) = \begin{cases} \frac{1}{R} & \text{für } R > R_{\text{Ion}} \\ -aR^2 + \varepsilon_b & \text{für } R \leq R_{\text{Ion}} \end{cases}. \quad (2.97)$$

Durch die Forderung der Stetigkeit des Potentials und seiner Ableitung bei $R = R_{\text{Ion}}$ kann der freie Parameter a in Gleichung (2.97) bestimmt werden. Es ergibt sich die folgende explizite Form des Ionenpotentials

$$\phi_{\text{Ion}}(R) = \begin{cases} \frac{1}{R} & \text{für } R > R_{\text{Ion}} \\ -\frac{4\varepsilon_b^3}{27}R^2 + \varepsilon_b & \text{für } R \leq R_{\text{Ion}} \end{cases}. \quad (2.98)$$

Durch Wahl des Parameters ε_b kann die Gesamtenergie des gebundenen Systems zum Zeitpunkt $t = 0$ festgelegt werden. Die hier vorgestellte Konstruktion eines effektiven Potentials stellt nur eine der vielen Möglichkeiten dar. In Abbildung 2.3 sind der Potentialtopf eines Ionenrumpfes bei einer Bindungsenergie von $\varepsilon_b = 1$ sowie das dazugehörige E -Feld gezeigt.

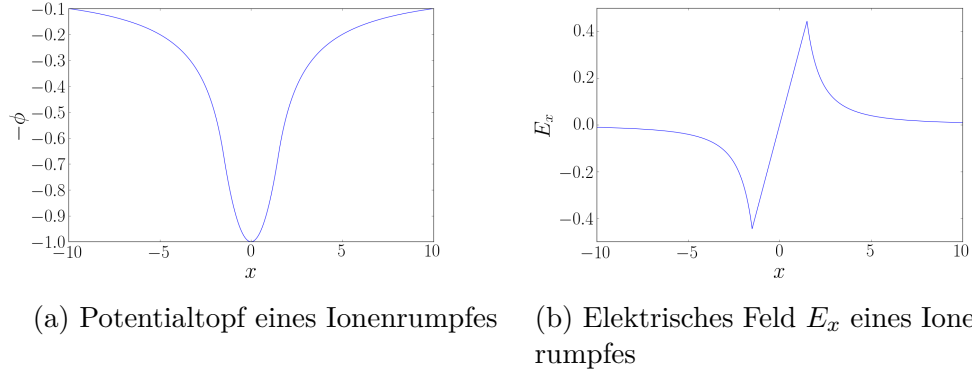


Abbildung 2.3: Potentialtopf und elektrisches Feld eines Ionenrumpfes bei einer Bindungsenergie von $\varepsilon_b = 1$.

Als Beispiel soll ein Würfel aus $5 \times 5 \times 5$ Atomen, bestehend aus jeweils einem Elektron und einem einfach geladenen Ion, im Feld einer externen ebenen Welle simuliert werden. Als Ionisierungsenergie soll $\varepsilon_b = 4.8 \times 10^{-3} m_e c^2$ gewählt werden. Die Amplitude der Welle ist $a_0 = 1.28 \times 10^{-3} m_e^2 c^4 / e^3$. Die Elektronen befinden sich anfänglich in Ruhe. Das Feld verschwindet zu Beginn der Simulation außerhalb des Ionenradius R_{Ion} im gesamten Raum, da sich dort die Felder der Elektronen und Ionenrümpfe kompensieren. Die Feldstärke der ebenen Welle ist stark genug, um die Elektronen aus ihren Potentialtöpfen zu reißen. Eine Zeitreihe der Simulation ist in Abbildung 2.4 gegeben.

2.5.2 Annihilierung von Elektron-Positron-Paaren

Der Prozess der Elektron-Positron-Paarproduktion ist im Einzelnen schwierig und soll daher in der vorliegenden Arbeit nicht behandelt werden. Es ist jedoch möglich, Elektronen und Positronen unter Vernachlässigung der Details ihrer Erzeugung als zum Zeitpunkt $t = 0$ existierende Teilchen anzusetzen.

Nähern sich ein e^- und ein e^+ adiabatisch auf einen Abstand $R < R_0$ an und reicht deren kinetische Energie nicht mehr aus, um den Potentialtopf zu

verlassen, so sollen sie sich annihilieren und aus der Simulation entfernt werden. Das Liénard-Wiechert-Potential (1.16) reduziert sich im adiabatischen Grenzfall auf das elektrostatische Potential

$$\phi = \frac{m_e c^2}{e} \frac{1}{R}. \quad (2.99)$$

Somit beträgt die Energie ε eines sich adiabatisch annähernden e^-e^+ -Paares, welches den Abstand R voneinander hat,

$$\varepsilon = -m_e c^2 \frac{1}{R}. \quad (2.100)$$

Die dabei freiwerdende Energie ist

$$\varepsilon_0 = m_e c^2 \frac{1}{R_0}. \quad (2.101)$$

Diese Energie muss der Paarvernichtungsenergie $2m_e c^2$ entsprechen. Somit ergibt sich für den Parameter R_0

$$\varepsilon_0 = m_e c^2 \frac{1}{R_0} \equiv 2m_e c^2 \quad \Rightarrow \quad R_0 = \frac{1}{2}. \quad (2.102)$$

Als Beispiel soll die Vernichtung eines e^+e^- -Paares simuliert werden. Beide Teilchen haben anfänglich eine Energie von $\gamma = 1.1$ und laufen mit einem Stoßparameter von $b = 3.0$ aufeinander zu. In jedem Zeitschritt der Simulation wird abgefragt, ob der kritische Abstand R_0 unterschritten worden ist. Falls dies der Fall ist, wird überprüft, ob die kinetische Energie der beiden Teilchen ausreicht, um sich wieder voneinander zu entfernen. Falls die kinetische Energie nicht ausreicht, annihilieren die beiden Teilchen und werden aus der Simulation entfernt. Die Teilchentrajektorien und die nach Gleichung (2.5) und (2.6) entstehenden Felder sind für verschiedene Zeitpunkte in Abbildung 2.5 gezeigt. Die Vernichtung der Teilchen findet zwischen Abb. 2.5b und Abb. 2.5c statt.

2.6 Beispiel: Strahlungsdämpfung im homogenen B -Feld

Als Beispiel wird die Bewegung eines einzelnen Elektrons in einem konstanten, homogenen B -Feld ($B_z = 0,001$) simuliert. Zur Integration wird das

Nyström-Verfahren angewandt. Als Bewegungsgleichungen werden (2.1) und (2.2) verwendet. Der Dämpfungsterm g^μ wird nach der Landau-Lifschitz-Gleichung (2.3) berechnet. Die Anfangsenergie des Elektrons beträgt $\gamma = 7$. Durch die Dämpfung bewegt sich das Teilchen auf einer Spiralbahn senkrecht zum Magnetfeld. In Abbildung 2.6a ist die Trajektorie des Teilchens gezeigt. In Abbildung 2.6b sind die Liénard-Wiechert-Felder (2.5) und (2.6), welche sich aus dieser Trajektorie ergeben, abgebildet. Um die Felder zu berechnen wurde eine lineare Interpolation der Trajektorie verwendet. Die spiralförmig abgestrahlten Felder sind deutlich zu erkennen. Die Abstrahlung von Energie in Form der Felder führt zu einer Reduktion der kinetischen Energie des Teilchens, was gerade durch den Dämpfungsterm g^μ in der Bewegungsgleichung beschrieben wird. Dies ergibt die spiralförmige Bewegung des Teilchens.

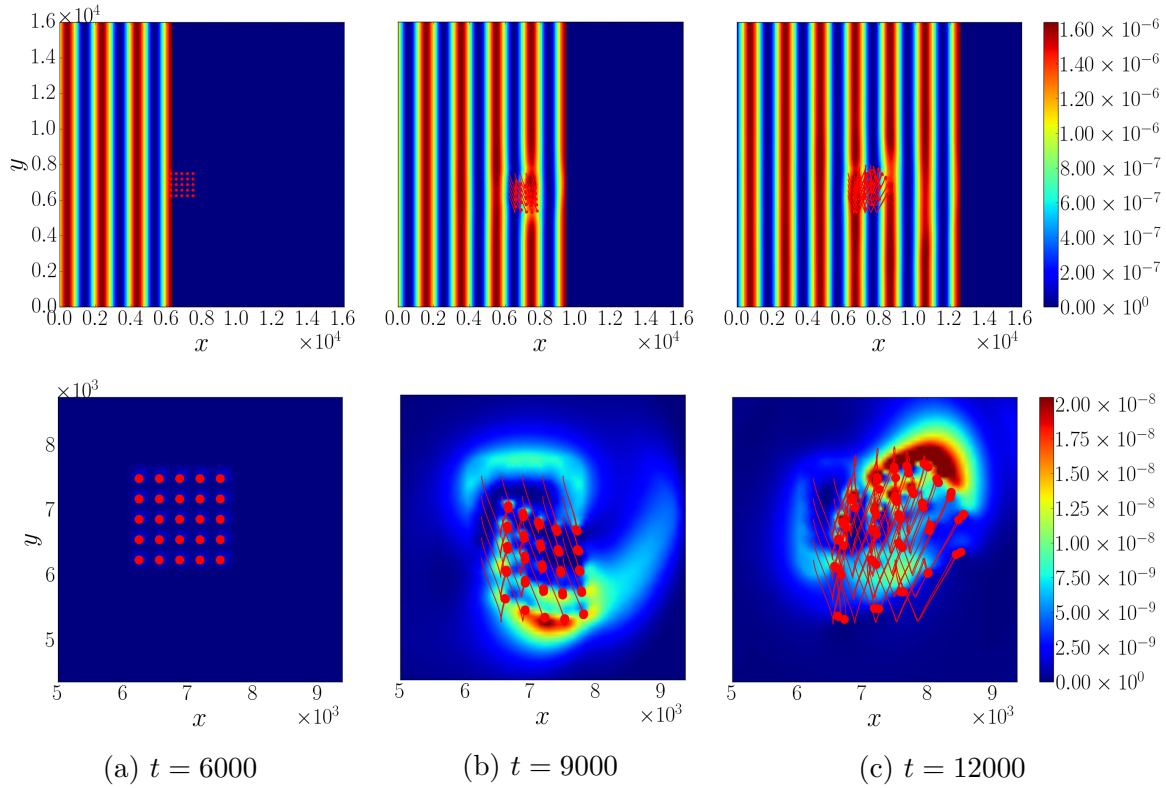


Abbildung 2.4: Ionisierung eines Systems aus $5 \times 5 \times 5$ Atomen durch eine externe ebene Welle. In der oberen Reihe ist das gesamte Feld abgebildet. In der unteren Reihe ist das externe Feld nicht mit abgebildet, damit die Felder der Elektronen und der Ionenrumpfe besser erkannt werden können. Die Parameter sind $\varepsilon_b = 4.8 \times 10^{-3} m_e c^2$, $a_0 = 1.28 \times 10^{-3}$. Die Farbskala bezeichnet $|\vec{E}|^2$. \vec{E} und $c\vec{B}$ in Einheiten $4\pi\varepsilon_0 m_e^2 c^4 / e^3 = 1.77 \cdot 10^{20} \text{ V/m}$, Längen in Einheiten $e^2 / (4\pi\varepsilon_0 m_e c^2) = 2.82 \cdot 10^{-15} \text{ m}$, Zeiten in Einheiten $e^2 / (4\pi\varepsilon_0 m_e c^3) = 9.40 \cdot 10^{-24} \text{ s}$.

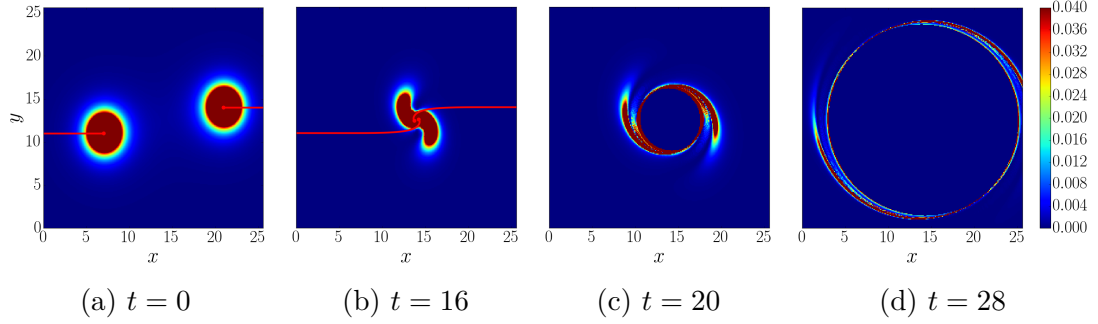


Abbildung 2.5: Annäherung eines e^+e^- -Paares bis zur Paarvernichtung. Beide Teilchen haben anfänglich eine Energie von $\gamma = 1.1$ und den Stoßparameter $b = 3.0$. Die Farbskala bezeichnet $|\vec{E}|^2$. \vec{E} und $c\vec{B}$ in Einheiten $4\pi\epsilon_0 m_e^2 c^4/e^3 = 1.77 \cdot 10^{20}$ V/m, Längen in Einheiten $e^2/(4\pi\epsilon_0 m_e c^2) = 2.82 \cdot 10^{-15}$ m, Zeiten in Einheiten $e^2/(4\pi\epsilon_0 m_e c^3) = 9.40 \cdot 10^{-24}$ s.

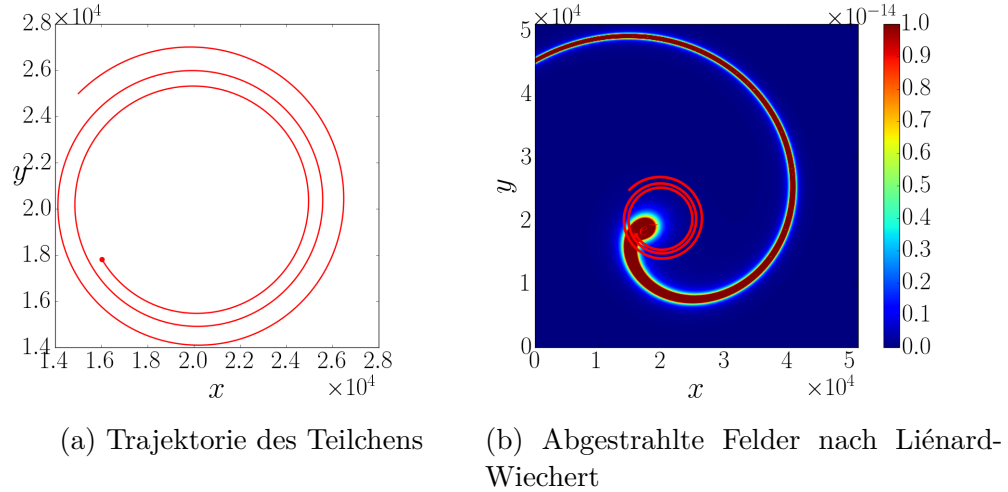


Abbildung 2.6: Beispiel: Strahlungsdämpfung eines Teilchens im homogenen Magnetfeld $B_z = 0,001$. Die Farbskala bezeichnet $|\vec{E}|^2$. \vec{E} und $c\vec{B}$ in Einheiten $4\pi\epsilon_0 m_e^2 c^4/e^3 = 1.77 \cdot 10^{20}$ V/m, Längen in Einheiten $e^2/(4\pi\epsilon_0 m_e c^2) = 2.82 \cdot 10^{-15}$ m, Zeiten in Einheiten $e^2/(4\pi\epsilon_0 m_e c^3) = 9.40 \cdot 10^{-24}$ s.

Kapitel 3

Hybride Felder

Um ein Plasma, welches aus N geladenen Teilchen besteht, zu simulieren, müssen für jedes einzelne Teilchen die Bewegungsgleichungen aus Abschnitt 1.5 mit einer der in Abschnitt 2.2 vorgestellten Methoden integriert werden. Die Anzahl der zu integrierenden Bewegungsgleichungen entspricht der Anzahl der Teilchen N . Für jedes der N Teilchen müssen die Felder am Ort des Teilchens bekannt sein. Diese werden von den jeweils anderen Teilchen erzeugt, wodurch $N - 1$ Feldberechnungen notwendig werden. Folglich skaliert der zur Integration der Bewegungsgleichungen erforderliche numerische Aufwand wie N^2 . Der numerische Aufwand steigt somit quadratisch mit der Teilchenzahl N . Da zur Berechnung der Felder die Liénard-Wiechert-Formeln (2.5) und (2.6) verwendet werden, muss zudem die Historie der Teilchenbewegungen abgespeichert werden. Für eine relativ kleine Teilchenzahl ist eine solche Simulation noch realisierbar, jedoch erreicht sie mit steigender Teilchenzahl schnell die Grenzen der verfügbaren Rechenleistung. Es muss daher nach einer alternativen Feldberechnung gesucht werden. Unter geeigneten Voraussetzungen kann es effizienter sein, die Felder auf einem numerischen Gitter abzuspeichern. Sind die Felder zur Zeit t an allen Gitterpunkten bekannt, so können sie direkt durch numerische Lösung der Maxwell-Gleichungen zu einem späteren Zeitpunkt berechnet werden.

3.1 Die numerische Integration der Maxwell-Gleichungen

In diesem Abschnitt soll beschrieben werden, wie die Maxwell-Gleichungen numerisch auf einem Gitter integriert werden können. Hierbei soll sich auf die Maxwell-Gleichungen im Vakuum beschränkt werden, da, wie später ersichtlich wird, nur die Propagation von Wellen weit entfernt von deren Quellen von Interesse ist.

3.1.1 Maxwell-Gleichungen

Die Propagation elektromagnetischer Felder wird durch die Maxwell-Gleichungen beschrieben [17, 11]. Die zuvor in Abschnitt 1.4.2 verwendeten Felder (2.5) und (2.6) stellen Lösungen dieser Gleichungen dar. Die numerische Auswertung der Liénard-Wiechert-Felder (2.5) und (2.6) unterscheidet sich grundlegend von der numerischen Integration der Maxwell-Gleichungen auf einem Gitter. Um die Zeitentwicklung der elektromagnetischen Felder auf einem Gitter numerisch zu berechnen, müssen die Maxwell-Gleichungen, ähnlich den Bewegungsgleichungen im vorherigen Kapitel, diskretisiert werden. Hierfür gibt es verschiedene Möglichkeiten. Im Folgenden soll der Yee-Algorithmus vorgestellt werden. Auf der anderen Seite erfordert die Auswertung der Liénard-Wiechert-Felder (2.5) und (2.6) die Historie der Teilchenbewegungen.

3.1.2 Maxwell-Solver

Um die Felder auf einem Gitter numerisch zu berechnen, soll der von Yee [29] vorgeschlagene Algorithmus verwendet werden. Dazu wird ein diskretes Gitter eingeführt. Die Gitterpunkte werden mit Feldwerten besetzt, welche in diskreten Zeitschritten mit Hilfe des Yee-Verfahrens aktualisiert werden. Die Lage eines Gitterpunktes im dreidimensionalen Raum wird durch drei ganzzahlige Indizes (j, k, l) definiert. Die räumlichen Abstände der Gitterpunkte in den drei Koordinatenrichtungen werden mit Δx , Δy und Δz bezeichnet. Der Abstand zwischen zwei aufeinanderfolgenden diskretisierten Zeitpunkten

wird mit Δt bezeichnet. Die diskretisierten Maxwell-Gleichungen lauten

$$\frac{\vec{E}_{(j,k,l)}^{n+\frac{1}{2}} - \vec{E}_{(j,k,l)}^{n-\frac{1}{2}}}{\Delta t} = +\nabla^- \times \vec{B}_{(j,k,l)}^n, \quad (3.1)$$

$$\frac{\vec{B}_{(j,k,l)}^{n+1} - \vec{B}_{(j,k,l)}^n}{\Delta t} = -\nabla^+ \times \vec{E}_{(j,k,l)}^{n+\frac{1}{2}}. \quad (3.2)$$

Die diskreten Operatoren ∇^+ und ∇^- werden folgendermaßen definiert

$$\nabla^+ F_{(j,k,l)} = \quad (3.3)$$

$$\left(\frac{F_{(j+1,k,l)} - F_{(j,k,l)}}{\Delta x}, \frac{F_{(j,k+1,l)} - F_{(j,k,l)}}{\Delta y}, \frac{F_{(j,k,l+1)} - F_{(j,k,l)}}{\Delta z} \right), \quad (3.4)$$

$$\nabla^- F_{(j,k,l)} = \left(\frac{F_{(j,k,l)} - F_{(j-1,k,l)}}{\Delta x}, \frac{F_{(j,k,l)} - F_{(j,k-1,l)}}{\Delta y}, \frac{F_{(j,k,l)} - F_{(j,k,l-1)}}{\Delta z} \right).$$

Wie durch die Indizes in (3.2) angedeutet, werden die Felder \vec{E} und \vec{B} nicht zu gleichen Zeitpunkten berechnet. Stattdessen sind die Zeitpunkte, zu denen \vec{E} berechnet wird, um $\Delta t/2$ gegenüber denen für \vec{B} verschoben. Hierdurch werden die finiten Differenzen in der Zeit zu zentrierten finiten Differenzen. Um auch für die Berechnung der Rotation zentrierte finite Differenzen zu erhalten, sind die Punkte, an denen die einzelnen Komponenten der Felder berechnet werden, räumlich gegeneinander versetzt. Die Positionen, an denen die Felder \vec{E} und \vec{B} berechnet werden, sind wie folgt gegeben

$$\vec{E}_{(j,k,l)} = \begin{pmatrix} E_x \left(\left(j + \frac{1}{2} \right) \Delta x, k \cdot \Delta y, l \cdot \Delta z \right) \\ E_y \left(j \cdot \Delta x, \left(k + \frac{1}{2} \right) \Delta y, l \cdot \Delta z \right) \\ E_z \left(j \cdot \Delta x, k \cdot \Delta y, \left(l + \frac{1}{2} \right) \Delta z \right) \end{pmatrix}, \quad (3.5)$$

$$\vec{B}_{(j,k,l)} = \begin{pmatrix} B_x \left(j \cdot \Delta x, \left(k + \frac{1}{2} \right) \Delta y, \left(l + \frac{1}{2} \right) \Delta z \right) \\ B_y \left(\left(j + \frac{1}{2} \right) \Delta x, k \cdot \Delta y, \left(l + \frac{1}{2} \right) \Delta z \right) \\ B_z \left(\left(j + \frac{1}{2} \right) \Delta x, \left(k + \frac{1}{2} \right) \Delta y, l \cdot \Delta z \right) \end{pmatrix}. \quad (3.6)$$

Durch diese Zentrierung erhält man ein Integrationsverfahren zweiter Ordnung.

Die Diskretisierung der Maxwell-Gleichungen im Yee-Algorithmus bewirkt eine Veränderung der Vakuum-Dispersionsrelation des Lichts. Die Di-

persionsrelation der diskretisierten Gleichungen, welche im Weiteren als numerische Dispersionsrelation bezeichnet werden soll, weicht für kleine Wellenlängen stark von der Vakuum-Dispersionsrelation der kontinuierlichen Maxwell-Gleichungen ab. Um dies genauer zu betrachten, wird der Ansatz einer ebenen Welle zur Lösung der diskreten Maxwell-Gleichungen gemacht

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = \vec{E}_0 e^{i(\vec{k}r - \omega t)}, \quad \vec{B}(\vec{r}, t) = \vec{B}_0 e^{i(\vec{k}r - \omega t)}. \quad (3.7)$$

Der Zusammenhang zwischen Frequenz ω und Wellenvektor \vec{k} kann durch Einsetzen des Ansatzes in die diskretisierten Maxwell-Gleichungen (3.2) bestimmt werden. Das Ergebnis lautet

$$\begin{aligned} \left[\frac{1}{\Delta t} \sin \left(\frac{\omega \Delta t}{2} \right) \right]^2 = \\ \left[\frac{1}{\Delta x} \sin \left(\frac{\tilde{k}_x \Delta x}{2} \right) \right]^2 + \left[\frac{1}{\Delta y} \sin \left(\frac{\tilde{k}_y \Delta y}{2} \right) \right]^2 + \left[\frac{1}{\Delta z} \sin \left(\frac{\tilde{k}_z \Delta z}{2} \right) \right]^2. \end{aligned} \quad (3.8)$$

Dies ist die numerische Dispersionsrelation. Zur Vereinfachung betrachten wir eine in x -Richtung laufende ebene Welle. Für diese erhalten wir die folgende Dispersionsrelation

$$\omega \Delta t = 2 \arcsin \left(\frac{\Delta t}{\Delta x} \sin \left(\frac{\tilde{k}_x \Delta x}{2} \right) \right). \quad (3.9)$$

Für die nicht diskretisierten Maxwell-Gleichungen lautet die entsprechende Vakuum-Dispersionsrelation $\omega = |\vec{k}|$. In Abbildung 3.1 sind beide Relationen gegenübergestellt. Je kleiner die Wellenlängen werden, desto größer wird der numerische Dispersionsfehler. Die numerische Dispersionsrelation hat ein Maximum bei $\tilde{k}_x \Delta x = \pi$, welches der Nyquist-Grenze des Gitters entspricht. Die Nyquist-Grenze gibt die maximale noch auf dem Gitter darstellbare Wellenzahl an

$$\tilde{k}_x^c = \frac{\pi}{\Delta x}. \quad (3.10)$$

Ein Wellenpaket bewegt sich mit der Gruppengeschwindigkeit

$$v_g = \left. \frac{d\tilde{k}_x}{d\omega} \right|_{\tilde{k}_x = \tilde{k}_x^p}. \quad (3.11)$$

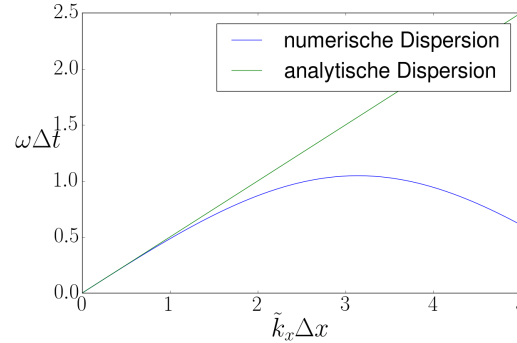


Abbildung 3.1: Numerische Dispersion bei $\frac{\Delta t}{\Delta x} = 0.5$

Liegt der zentrale Wert \tilde{k}_x^p seiner Wellenzahlen bei der Nyquist-Grenze \tilde{k}_x^c , so verschwindet die Gruppengeschwindigkeit

$$v_g^c = \left. \frac{d\tilde{k}_x}{d\omega} \right|_{\tilde{k}_x = \tilde{k}_x^c} = 0. \quad (3.12)$$

Die Wellenzahl \tilde{k}_x^c entspricht einer Wellenlänge

$$\lambda_x^c = 2\Delta x. \quad (3.13)$$

Wellenpakete mit einer zentralen Wellenlänge von λ_x^c bleiben auf dem Gitter stehen, anstatt sich mit Lichtgeschwindigkeit auszubreiten. Das numerische Verfahren ist somit nur für Wellen mit Wellenlängen $\lambda \ll \lambda_x^c$ geeignet. Dieses Problem wird in Kapitel 4 wieder aufgegriffen.

3.2 Hybrider Ansatz für die Felder

Nachdem in Abschnitt 3.1.2 gezeigt wurde wie Felder auf einem Gitter gespeichert und propagiert werden können, soll nun von dieser Möglichkeit in der Simulation Gebrauch gemacht werden. Wie bereits erwähnt lassen sich Felder nur sinnvoll auf einem Gitter abbilden, wenn die Feldstärke auf Längenskalen variiert, welche groß im Vergleich zur Gitterkonstanten sind. Die von Punktteilchen erzeugten Felder lassen sich somit aufgrund der Singularität in unmittelbarer Nähe der Quelle nicht auf dem Gitter darstellen.

MicPIC-Simulationen [26, 21] lösen diese Schwierigkeit indem sie mit Hilfe von Formfaktoren Stromdichten auf einem numerischen Gitter berechnen,

welche wiederum gemäß den Maxwell-Gleichungen Felder erzeugen. Nur für die Wechselwirkung bei kleinen Abständen wird auf das Punktteilchenkonzept zurückgegriffen.

In dieser Arbeit wird ein anderer Ansatz verwendet, bei dem die Felder in Nah- und Fernfelder unterteilt werden. Im Nahfeldbereich sollen die Felder nach (2.5) und (2.6) berechnet und im Fernfeldbereich auf einem Gitter gespeichert werden. Die Fernfelder auf dem Gitter werden mit Hilfe des Yee-Algorithmus propagiert. Der Nahfeldbereich um ein Teilchen, innerhalb dessen eine molekulardynamische Wechselwirkung mit anderen Teilchen stattfindet, kann hierbei, wie im Folgenden erläutert wird, beliebig groß gewählt werden. Innerhalb dieses Bereiches werden die entsprechenden Feldbeiträge explizit vom Maxwell-Solver ausgenommen. Der Übergang von Nah- in den Fernfeldbereich wird durch explizites Anpassen der Feldwerte für den Maxwell-Solver an den Bereichsgrenzen realisiert. Als zusätzlicher positiver Effekt ist hervorzuheben, dass durch diese Methode die Notwendigkeit zur Deposition von Strömen auf einem Gitter vollständig entfällt und stattdessen die Felder auf dem numerischen Gitter durch das soeben erwähnte explizite Anpassen der Randwerte erzeugt werden. Da somit zu keinem Zeitpunkt weder Felder noch Ströme nahe dem diese erzeugenden Teilchens auf einem numerischen Gitter berechnet werden müssen, ist es an keiner Stelle nötig vom Konzept des in Abschnitt 1.4.1 eingeführten Quasipunktteilchens abzuweichen.

3.2.1 Aufteilung in Nah- und Fernfelder

Um eine Aufteilung der Felder in Nah- und Fernfelder vorzunehmen, wird der Koordinatenraum zunächst gleichmäßig in verschiedene würfelförmige Bereiche unterteilt. Jeder dieser Bereiche enthält ein Gitter, auf welchem Felder gespeichert werden können. Auf dem Gitter sollen nur Fernfeldbeiträge gespeichert werden, da die Nahfeldbeiträge über die Liénard-Wiechert-Felder (2.5) und (2.6) berechnet werden.

Um die Aufteilung in Nah- und Fernfelder genauer zu erklären, soll zunächst ein Beispiel mit drei Teilchen betrachtet werden. In Bild 3.2a ist zu sehen, wie der Raum in Bereiche (Boxen) unterteilt wird. Die drei Teilchen im Raum können somit jeweils einer bestimmten Box zugeordnet werden, in der sie sich gerade befinden. Die Box, in der sich ein Teilchen p befindet, sowie deren unmittelbare Nachbarboxen, definieren den Nahfeldbereich von p . Im Beispiel definieren die Boxen, die mit dem Label 1 versehen sind, den

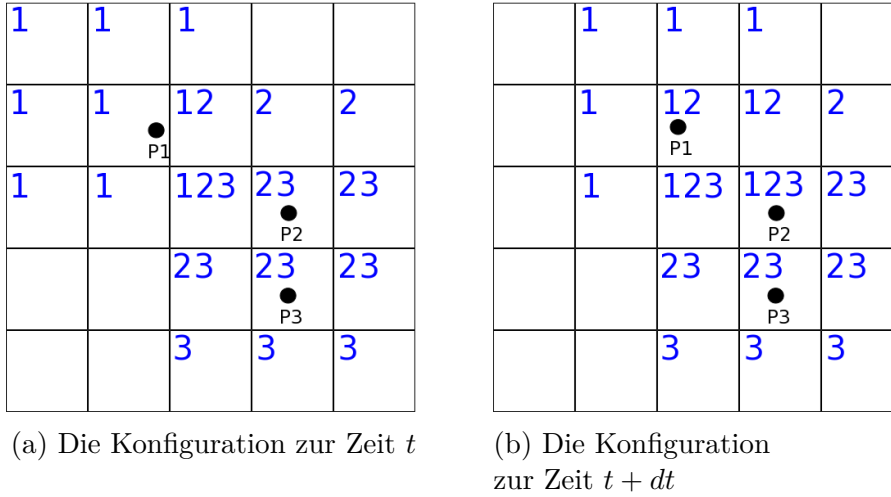


Abbildung 3.2: Aufteilung des Raumes in Quader, wodurch die Nah- und Fernbereiche der einzelnen Teilchen definiert werden für eine Beispielkonfiguration mit drei Teilchen zu zwei aufeinanderfolgenden Zeitpunkten.

Nahfeldbereich von Teilchen 1. Diejenigen, die *nicht* mit dem Label 1 versehen sind, definieren den Fernfeldbereich von Teilchen 1. Da auf dem Gitter innerhalb einer Box nur Fernfelder gespeichert werden sollen, enthält das Gitter innerhalb einer Box mit Label 1 keine Felder, die von Teilchen 1 erzeugt worden sind. Dies gilt analog für Teilchen 2 und 3. Wenn eines der Teilchen wie in 3.2b dargestellt im Laufe der Zeit in eine andere Box wandert, müssen die Labels der Boxen und die Felder auf dem Gitter entsprechend angepasst werden. Somit ist sichergestellt, dass nur Fernfelder auf dem Gitter gespeichert werden. Hierzu wird für jede Box Buch geführt, welche Teilchen sich gerade innerhalb der Box befinden.

Die Fernfelder, welche auf dem Gitter in den verschiedenen Boxen gespeichert sind, werden mit dem Feldpusher wie in Abschnitt 3.1.2 beschrieben integriert. Hierbei müssen die Randwerte an den Grenzen zwischen zwei Boxen korrekt gesetzt werden. In Bild 3.3 ist beispielhaft ein Gitter dargestellt, bei dem die roten Gitterpunkte im Nahfeldbereich des Teilchens q liegen. Betrachtet man den Gitterpunkt $(2, 4, l)$ für die Feldkomponente B_z . Nach den

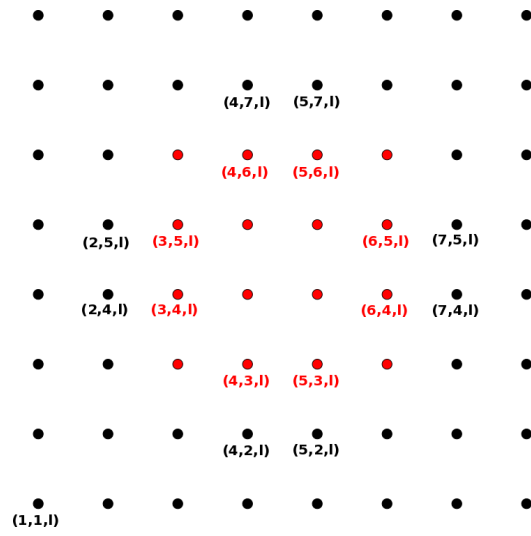


Abbildung 3.3: Grenze zwischen Nah- und Fernfeld Bereich eines Teilchens q auf dem Gitter. Die roten Punkte befinden sich im Nahfeldbereich von q , die schwarzen hingegen im Fernfeldbereich. Entsprechend enthält das Feld an den roten Gitterstellen *nicht* den Feldbeitrag des Teilchens q .

Maxwell-Gleichungen ist die zeitliche Entwicklung von B_z wie folgt gegeben

$$\frac{\partial B_z}{\partial t} = - \left(\frac{\partial E_y}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial y} \right). \quad (3.14)$$

Gemäß dem Yee-Solver aus Abschnitt 3.1.2 ergibt sich die folgende Diskretisierung an dem Gitterpunkt $(2, 4, l)$

$$B_{z(2,4,l)}^{n+1} = B_{z(2,4,l)}^n - \Delta t \left(\frac{\textcolor{red}{E}_{y(3,4,l)}^{n+\frac{1}{2}} - E_{y(2,4,l)}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta x} - \frac{E_{x(2,5,l)}^{n+\frac{1}{2}} - E_{x(2,4,l)}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta y} \right). \quad (3.15)$$

Wie in Abbildung 3.3 dargestellt, befindet sich der Gitterpunkt $(3, 4, l)$ innerhalb des Nahfeldbereichs von Teilchen q . Der Feldbeitrag dieses Teilchens ist somit an dieser Stelle nicht auf dem Gitter enthalten. Deshalb muss der Feldbeitrag E_{yp} zu dem Gitterwert $\textcolor{red}{E}_y$ hinzuaddiert werden, damit die zeitliche Propagation von B_z in (3.15) korrekt ist. Die korrekte Diskretisierung an der Stelle $(2, 4, l)$ lautet somit

$$B_{z(2,4,l)}^{n+1} = B_{z(2,4,l)}^n - \Delta t \left(\frac{\left(\textcolor{red}{E}_{y(3,4,l)}^{n+\frac{1}{2}} + E_{yq(3,4,l)}^{n+\frac{1}{2}} \right) - E_{y(2,4,l)}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta x} - \frac{E_{x(2,5,l)}^{n+\frac{1}{2}} - E_{x(2,4,l)}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta y} \right). \quad (3.16)$$

An den anderen Gitterstellen müssen die Anpassungen entsprechend vorgenommen werden. An der Stelle $(4, 2, l)$ ist die korrekte Diskretisierung für B_z

$$B_{z(4,2,l)}^{n+1} = B_{z(4,2,l)}^n - \Delta t \left(\frac{E_{y(5,2,l)}^{n+\frac{1}{2}} - E_{y(4,2,l)}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta x} - \frac{\left(\textcolor{red}{E}_{x(4,3,l)}^{n+\frac{1}{2}} + E_{xq(4,3,l)}^{n+\frac{1}{2}} \right) - E_{x(4,2,l)}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta y} \right). \quad (3.17)$$

An der Stelle $(6, 4, l)$ ist die korrekte Diskretisierung für B_z

$$\textcolor{red}{B}_{z(6,4,l)}^{n+1} = \textcolor{red}{B}_{z(6,4,l)}^n - \Delta t \left(\frac{\left(E_{y(7,4,l)}^{n+\frac{1}{2}} - E_{yq(7,4,l)}^{n+\frac{1}{2}} \right) - \textcolor{red}{E}_{y(6,4,l)}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta x} - \frac{\textcolor{red}{E}_{x(6,5,l)}^{n+\frac{1}{2}} - \textcolor{red}{E}_{x(6,4,l)}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta y} \right). \quad (3.18)$$

Und an der Stelle (4, 6, l) ist die korrekte Diskretisierung für B_z

$$\begin{aligned} B_{z(4,6,l)}^{n+1} = & B_{z(4,6,l)}^n \\ & - \Delta t \left(\frac{E_{y(5,6,l)}^{n+\frac{1}{2}} - E_{y(4,6,l)}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta x} - \frac{\left(E_{x(4,7,l)}^{n+\frac{1}{2}} - E_{xq(4,7,l)}^{n+\frac{1}{2}} \right) - E_{x(4,6,l)}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta y} \right). \end{aligned} \quad (3.19)$$

Die Felder E_{xq} und E_{yq} für das Teilchen q werden nach Gleichung (2.5) und (2.6) berechnet

$$E_{xq(4,3,l)}^{n+\frac{1}{2}} = E_{xq} \left(\frac{9}{2} \Delta x, 3 \Delta y, l \Delta z, \left(n + \frac{1}{2} \right) \Delta t \right), \quad (3.20)$$

$$E_{xq(4,7,l)}^{n+\frac{1}{2}} = E_{xq} \left(\frac{9}{2} \Delta x, 7 \Delta y, l \Delta z, \left(n + \frac{1}{2} \right) \Delta t \right), \quad (3.21)$$

$$E_{yq(3,4,l)}^{n+\frac{1}{2}} = E_{yq} \left(3 \Delta x, \frac{9}{2} \Delta y, l \Delta z, \left(n + \frac{1}{2} \right) \Delta t \right), \quad (3.22)$$

$$E_{yq(7,4,l)}^{n+\frac{1}{2}} = E_{yq} \left(7 \Delta x, \frac{9}{2} \Delta y, l \Delta z, \left(n + \frac{1}{2} \right) \Delta t \right). \quad (3.23)$$

Als zweites Beispiel wird die zeitliche Propagation von E_z betrachtet. Diese erhält man wieder aus den Maxwell-Gleichungen

$$\frac{\partial E_z}{\partial t} = \left(\frac{\partial B_y}{\partial x} - \frac{\partial B_x}{\partial y} \right). \quad (3.24)$$

An der Stelle (3, 5, l) ist die korrekte Diskretisierung für E_z

$$\begin{aligned} E_{z(3,5,l)}^{n+\frac{1}{2}} = & E_{z(3,5,l)}^{n-\frac{1}{2}} \\ & + c^2 \Delta t \left(\frac{B_{y(3,5,l)}^n - \left(B_{y(2,5,l)}^n - B_{yq(2,5,l)}^n \right)}{\Delta x} - \frac{B_{x(3,5,l)}^n - B_{x(3,4,l)}^n}{\Delta y} \right). \end{aligned} \quad (3.25)$$

An der Stelle (5, 3, l) ist die korrekte Diskretisierung für E_z

$$\begin{aligned} E_{z(5,3,l)}^{n+\frac{1}{2}} = & E_{z(5,3,l)}^{n-\frac{1}{2}} \\ & + c^2 \Delta t \left(\frac{B_{y(5,3,l)}^n - B_{y(4,3,l)}^n}{\Delta x} - \frac{B_{x(5,3,l)}^n - \left(B_{x(5,2,l)}^n - B_{xq(5,2,l)}^n \right)}{\Delta y} \right). \end{aligned} \quad (3.26)$$

An der Stelle $(7, 5, 1)$ ist die korrekte Diskretisierung für E_z

$$E_{z(7,5,l)}^{n+\frac{1}{2}} = E_{z(7,5,l)}^{n-\frac{1}{2}} + c^2 \Delta t \left(\frac{B_{y(7,5,l)}^n - (\textcolor{red}{B}_{y(6,5,l)}^n + \textcolor{blue}{B}_{yq(6,5,l)}^n)}{\Delta x} - \frac{B_{x(7,5,l)}^n - B_{x(7,4,l)}^n}{\Delta y} \right). \quad (3.27)$$

Und an der Stelle $(5, 7, 1)$ ist die korrekte Diskretisierung für E_z

$$E_{z(5,7,l)}^{n+\frac{1}{2}} = E_{z(5,7,l)}^{n-\frac{1}{2}} + c^2 \Delta t \left(\frac{B_{y(5,7,l)}^n - B_{y(4,7,l)}^n}{\Delta x} - \frac{B_{x(5,7,l)}^n - (\textcolor{red}{B}_{x(5,6,l)}^n + \textcolor{blue}{B}_{xq(5,6,l)}^n)}{\Delta y} \right). \quad (3.28)$$

Die Felder $\textcolor{blue}{B}_{xq}$ und $\textcolor{blue}{B}_{yq}$ für das Teilchen q werden wieder nach Gleichung (2.5) und (2.6) berechnet

$$\textcolor{blue}{B}_{xq(5,2,l)}^n = B_{xq} \left(5\Delta x, \frac{5}{2}\Delta y, \left(l + \frac{1}{2} \right) \Delta z, n\Delta t \right), \quad (3.29)$$

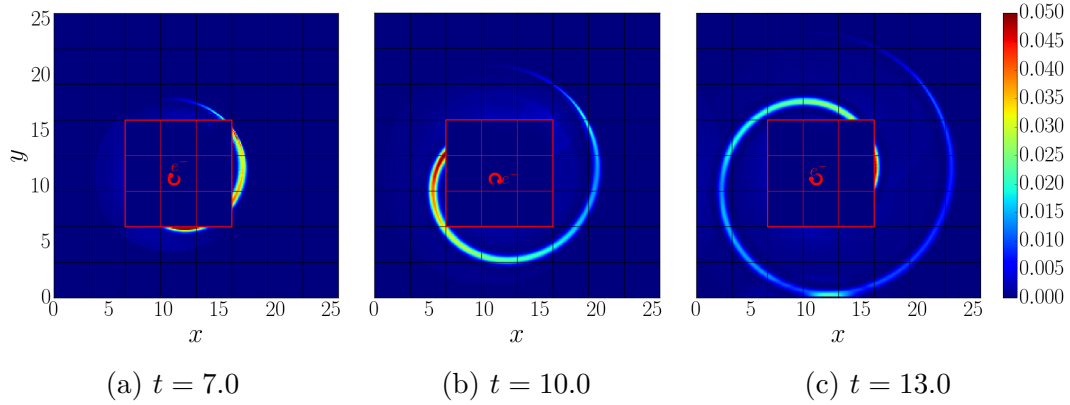
$$\textcolor{blue}{B}_{xq(5,6,l)}^n = B_{xq} \left(5\Delta x, \frac{13}{2}\Delta y, \left(l + \frac{1}{2} \right) \Delta z, n\Delta t \right), \quad (3.30)$$

$$\textcolor{blue}{B}_{yq(2,5,l)}^n = B_{yq} \left(\frac{5}{2}\Delta x, 5\Delta y, \left(l + \frac{1}{2} \right) \Delta z, n\Delta t \right), \quad (3.31)$$

$$\textcolor{blue}{B}_{yq(6,5,l)}^n = B_{yq} \left(\frac{13}{2}\Delta x, 5\Delta y, \left(l + \frac{1}{2} \right) \Delta z, n\Delta t \right). \quad (3.32)$$

In dem Beispiel aus Abbildung 3.3 müssen noch an allen weiteren Gitterstellen entlang der Grenze zwischen Nah- und Fernfeldbereich entsprechende Anpassungen durchgeführt werden. Um allgemein die Felder in einer Box zu pushen, muss somit bekannt sein, für welche Teilchen diese Box im Nahfeldbereich liegt sowie für welche Teilchen die Nachbarboxen im Nahfeldbereich liegen. Dies ist bekannt, da für jede Box Buch geführt wird, welche Teilchen sich gerade innerhalb der Box befinden. Es muss noch betont werden, dass das Konzept der Nah- und Fernfelder nicht auf das FDTD-Schema begrenzt ist. Das Setzen der Nahfeldbereichsgrenzen durch retardierte Felder nach Gleichungen (2.5) und (2.6) ersetzt die entsprechende Stromdeposition im PIC-Verfahren.

Als Beispiel soll die Gyration eines einzelnen Elektrons bei $\gamma = 1.1$ in einem externen homogenen Magnetfeld B_z betrachtet werden. Das Elektron



Abbildungung 3.4: Zeitliche Evolution des Fernfeldes eines im konstanten Magnetfeld $B_z = 1$ gyrierenden Elektrons $\gamma = 1,1$. Die Farbskala bezeichnet $|\vec{E}|^2$ des Fernfeldes. \vec{E} und $c\vec{B}$ in Einheiten $4\pi\epsilon_0 m_e^2 c^4 / e^3 = 1.77 \cdot 10^{20} \text{ V/m}$, Längen in Einheiten $e^2 / (4\pi\epsilon_0 m_e c^2) = 2.82 \cdot 10^{-15} \text{ m}$, Zeiten in Einheiten $e^2 / (4\pi\epsilon_0 m_e c^3) = 9.40 \cdot 10^{-24} \text{ s}$.

führt eine Kreisbewegung in der xy -Ebene aus. Die dabei entstehenden Fernfelder, welche auf dem Gitter gespeichert werden, sind in Abbildung 3.4 zu verschiedenen Zeitpunkten gezeigt. Die Anfangsbedingungen wurden hierbei so gewählt, dass das Elektron im Laufe der Simulation niemals seine anfängliche Box verlässt. Die Begrenzung des Nahfeldbereichs bleibt somit zeitlich unverändert. Der Nahfeldbereich besteht aus 27 Boxen, deren Begrenzungen in Abbildung 3.4 durch rote Linien dargestellt sind. Da nur ein 2-dimensionaler Schnitt abgebildet werden kann, sind nur 9 der 27 Boxen in der Abbildung zu sehen. Das Teilchen liefert innerhalb seines Nahfeldbereichs keine Feldbeiträge auf dem Gitter.

Im Folgenden soll die Propagation der Felder genauer betrachtet werden. Es soll angenommen werden, dass zur Zeit $t = 0$ keine Felder vorhanden sind und das Elektron für $t < 0$ nicht existiert. Am Anfang der Simulation ist zunächst kein Feld vorhanden. Die einzige Stelle, an der Felder entstehen können, ist die Grenze zwischen dem Nahfeld- und dem Fernfeldbereich, da der Maxwell-Pusher dort die Felder anpassen muss. Aufgrund des Retardierungseffekt entstehen Felder an den Grenzflächen erst, sobald $t_p^{ret} \geq 0$ gilt, da das Elektron für $t < 0$ nicht existiert. Sobald $t_p^{ret} > 0$ erreicht ist, entstehen Felder an der Grenzfläche. Die Welle propagiert in den Fernfeldbereich.

3.2.2 Propagation der Teilchen über Boxgrenzen

Um ein Teilchen zu pushen, müssen die Felder am Ort des Teilchens bekannt sein. Der Großteil der Felder ist bereits auf dem Gitter derjenigen Box gespeichert, in welcher sich das zu pushende Teilchen gerade befindet. Zu diesen Feldern müssen noch die Nahfelder addiert werden, die nicht auf dem Gitter gespeichert werden. Das sind die Felder der anderen Teilchen aus derselben Box wie das zu pushende Teilchen, sowie aus deren Nachbarboxen. Da für jede Box Buch geführt wird, welche Teilchen sich gerade innerhalb der Box befinden, sind diese Felder leicht mit den Liénard-Wiechert-Formeln (2.5) und (2.6) zu berechnen.

Wenn ein Teilchen von einer Box in eine andere wandert, so verschiebt sich sein Nahfeldbereich, da dieser *per definitionem* aus derjenigen Box besteht, in dem sich das Teilchen gerade befindet, und deren Nachbarboxen. Ein Beispiel ist in Abbildung 3.5 gezeigt. Für die einzelnen Boxen können drei

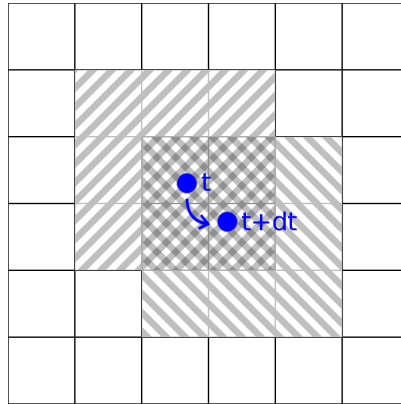
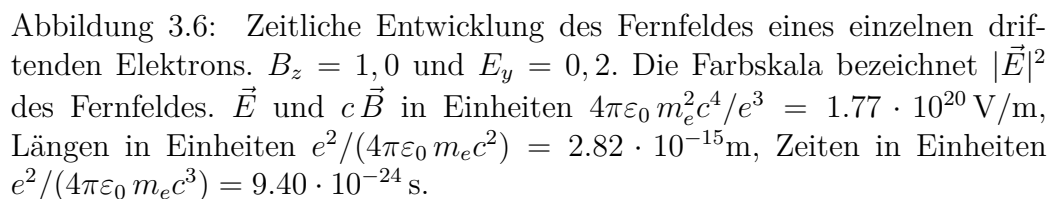


Abbildung 3.5: Wenn ein Teilchen q zwischen den Zeitpunkten t und $t + dt$ seine Box wechselt, dann verschiebt sich sein Nahfeldbereich. markiert den Nahfeldbereich zur Zeit t und zur Zeit $t + dt$. Die Punkte zeigen die Position des Teilchens zur Zeit t und $t + dt$. Zur Zeit $t + dt$ verlassen die oberen linken Boxen den Nahfeldbereich und die unteren rechten Boxen kommen hinzu.

verschiedene Situationen auftreten. Zum einen gibt es Boxen, welche vor dem Pushen zu dem Nahfeldbereich eines Teilchens q gehören, aber zum Fernfeldbereich nach dem Pushen. Beim Übergang einer Box vom Nahfeld- in den Fernfeldbereich eines Teilchens q müssen die Felder dieses Teilchens auf dem

Als Beispiel ist in Abbildung 3.6 die Simulation eines Elektrons gezeigt, welches in einem gekreuzten externen E - und B -Feld driftet. Die Größen der



Felder sind $E_y = 0.2$ und $cB_z = 1.0$ jeweils in Einheiten von $4\pi\epsilon_0 m_e^2 c^4 / e^3$. Die Verschiebung des Nahfeldbereichs ist klar zu erkennen. In der Abbildung

sieht man, dass der Nahfeldbereich zwischen den Zeiten $t = 9$ und $t = 10$ um eine Boxlänge nach rechts verschoben wird. Hierbei verlassen die Boxen am linken Rand den Nahfeldbereich und am rechten Rand kommen neue Boxen zum Nahfeldbereich hinzu. In den linken Boxen, welche den Nahfeldbereich verlassen, müssen die Felder des Teilchens auf das Gitter gesetzt werden. In den rechten Boxen, welche zum Nahfeldbereich hinzukommen, werden die Felder des Teilchens vom Gitter subtrahiert, da diese nun zum Nahfeldbereich gehören.

Als weitere Beispiele wollen wir nun zwei Streuexperimente, einmal die Streuung zweier Elektronen, und einmal die Streuung eines Elektrons und eines Positrons, betrachten. Die Streuungen finden jeweils bei Teilchenenergien von $\gamma = 1.4$ statt. In den Abbildungen 3.7 und 3.8 sind einige Momentaufnahmen der Simulationen zu verschiedenen Zeiten gezeigt. Wie man in der

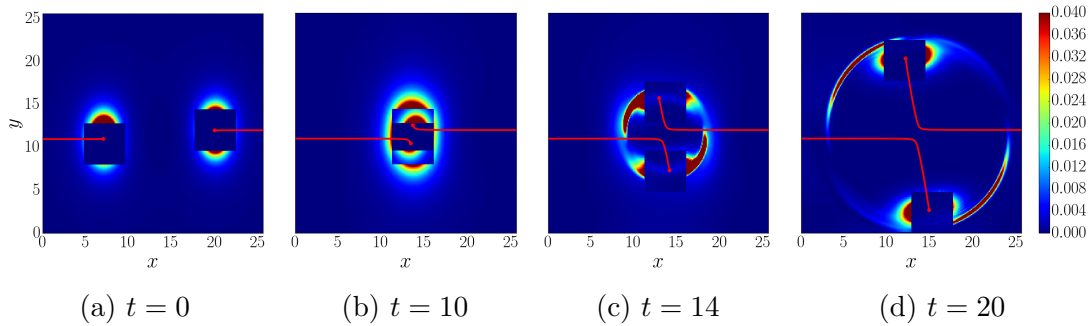


Abbildung 3.7: Fernfeld der e^-e^- -Streuung zu verschiedenen Zeitpunkten t bei $\gamma = 1,4$ und Stoßparameter $a = 1$. Die Farbskala bezeichnet $|\vec{E}|^2$ des Fernfeldes. \vec{E} und $c\vec{B}$ in Einheiten $4\pi\epsilon_0 m_e^2 c^4 / e^3 = 1.77 \cdot 10^{20} \text{ V/m}$, Längen in Einheiten $e^2 / (4\pi\epsilon_0 m_e c^2) = 2.82 \cdot 10^{-15} \text{ m}$, Zeiten in Einheiten $e^2 / (4\pi\epsilon_0 m_e c^3) = 9.40 \cdot 10^{-24} \text{ s}$.

Abbildung erkennen kann, findet die stärkste Wechselwirkung zwischen den Elektronen im Nahfeldbereich statt. In diesem Bereich wird die Wechselwirkung durch die Liénard-Wiechert-Potentiale berechnet. Die bei der Streuung entstehenden Wellen werden am Rand des Nahfeldbereichs auf das Gitter gesetzt und propagieren auf dem Gitter im Fernfeldbereich. Dieses Beispiel verdeutlicht den hybriden Charakter der Felder. Während der Streuung wird die Wechselwirkung durch die Liénard-Wiechert-Potentiale berechnet. Somit ist eine sehr genaue Berechnung der Wechselwirkung möglich. Die Genauigkeit der Simulation ist an dieser Stelle *nicht* durch die endliche Gitterauflösung

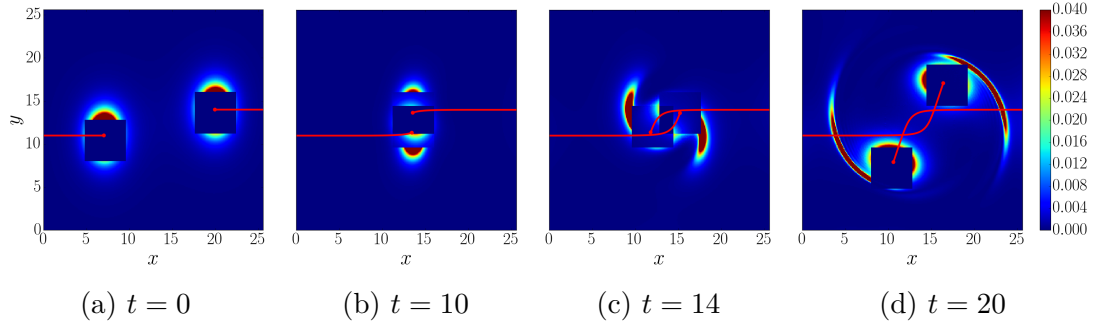


Abbildung 3.8: Fernfeld der e^-e^+ -Streuung zu verschiedenen Zeitpunkten t bei $\gamma = 1,4$ und Stoßparameter $a = 1$. Die Farbskala bezeichnet $|\vec{E}|^2$ des Fernfeldes. \vec{E} und $c\vec{B}$ in Einheiten $4\pi\epsilon_0 m_e^2 c^4 / e^3 = 1.77 \cdot 10^{20} \text{ V/m}$, Längen in Einheiten $e^2 / (4\pi\epsilon_0 m_e c^2) = 2.82 \cdot 10^{-15} \text{ m}$, Zeiten in Einheiten $e^2 / (4\pi\epsilon_0 m_e c^3) = 9.40 \cdot 10^{-24} \text{ s}$.

beschränkt.

Nun soll ein Beispiel mit mehreren Teilchen vorgestellt werden. Es wird die Streuung von 27 Teilchen an einer ebenen Welle simuliert. Ein einzelnes Teilchen in einer ebenen Welle führt die bekannte Bewegung in Form einer *Acht* durch. In dem vorgestellten Beispiel wird diese Bewegung durch die Abstoßung zwischen den Teilchen gestört. Die 27 Teilchen sind in einem Würfel angeordnet und haben einen Abstand von $a = 6250$. In Abbildung 3.9 sind die Ergebnisse der Simulation zu verschiedenen Zeiten dargestellt. In Abbildung 3.10 sind die Fernfelder der Teilchen separat dargestellt.

3.2.3 Konvergenz

Anhand eines einfachen Beispiels soll gezeigt werden, dass die Fernfelder auf dem Gitter für kleine Gitterkonstanten Δx gegen die Liénard-Wiechert-Lösungen konvergieren. Hierzu soll wieder ein einzelnes Teilchen im homogenen Magnetfeld betrachtet werden. Um die Konvergenz deutlich zeigen zu können, wird eine niedrige Teilchenenergie von $\gamma = 1.1$ gewählt, damit alle Frequenzanteile der emittierten Strahlung problemlos auf dem Gitter aufgelöst werden können. Auf das Problem der beschränkten Gitterauflösung bei Emission von hochfrequenter Strahlung wird in Kapitel 4 im Detail eingegangen. In Abbildung 3.11 sind die Fernfelder der hybriden Simulation im Vergleich zur Liénard-Wiechert-Lösung für unterschiedliche Gitterauflösun-

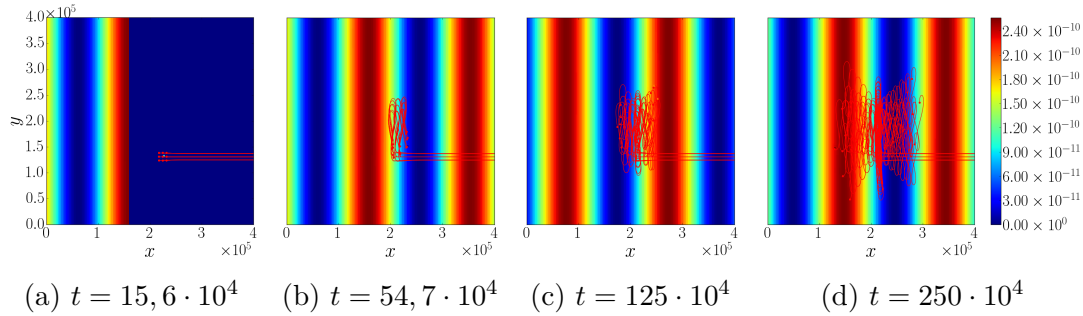


Abbildung 3.9: Streuung von $27 e^-$ an einer ebenen Welle. Die Farbskala bezeichnet $|\vec{E}|^2$. \vec{E} und $c\vec{B}$ in Einheiten $4\pi\epsilon_0 m_e^2 c^4 / e^3 = 1.77 \cdot 10^{20} \text{ V/m}$, Längen in Einheiten $e^2 / (4\pi\epsilon_0 m_e c^2) = 2.82 \cdot 10^{-15} \text{ m}$, Zeiten in Einheiten $e^2 / (4\pi\epsilon_0 m_e c^3) = 9.40 \cdot 10^{-24} \text{ s}$.

gen Δx gezeigt. Um die Güte der hybriden Simulation abschätzen zu können, wird die Abweichung ΔW der gesamten Feldenergie W der Fernfelder aus der hybriden Simulation von den Liénard-Wiechert-Feldern betrachtet

$$W = \int \frac{1}{2} (|\vec{E}|^2 + |\vec{B}|^2) d\vec{x}. \quad (3.33)$$

Es wird der absolute Fehler ΔW und den relativen Fehler ε betrachtet

$$\Delta W = |W_{\text{analyt}} - W_{\text{hybrid}}|, \quad \varepsilon = \frac{|W_{\text{analyt}} - W_{\text{hybrid}}|}{W_{\text{analyt}}}. \quad (3.34)$$

In Abbildung 3.12 sind diese Fehler für verschiedene Auflösungen Δx gezeigt. Man kann deutlich erkennen, dass die Fernfelder der hybriden Simulationen bei immer feiner werdender Auflösung Δx gegen die Liénard-Wiechert-Lösung konvergieren.

3.2.4 Setup der Fernfelder

Nun soll noch die Frage beantwortet werden, wie die Gitterwerte zu Beginn einer Simulation zu initialisieren sind. Die Positionen der Teilchen und der Felder auf dem Gitter müssen konsistent sein. Es bieten sich zwei Vorgehensweisen an. Zum einen kann man die Positionen der Teilchen zum Anfangszeitpunkt $t = 0$ (sowie die Historie der Teilchen) beliebig festlegen und aus diesen Positionen die initialen Fernfelder auf dem Gitter mit Hilfe der

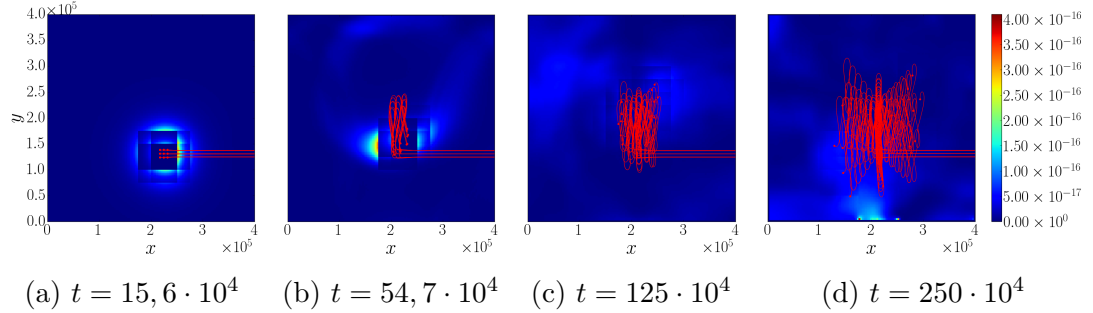


Abbildung 3.10: Fernfeld der Streuung von 27 e^- an einer ebenen Welle. Die Farbskala bezeichnet $|\vec{E}|^2$ des Fernfeldes. \vec{E} und $c\vec{B}$ in Einheiten $4\pi\epsilon_0 m_e^2 c^4 / e^3 = 1.77 \cdot 10^{20} \text{ V/m}$, Längen in Einheiten $e^2 / (4\pi\epsilon_0 m_e c^2) = 2.82 \cdot 10^{-15} \text{ m}$, Zeiten in Einheiten $e^2 / (4\pi\epsilon_0 m_e c^3) = 9.40 \cdot 10^{-24} \text{ s}$.

Liénard-Wiechert-Potentiale nach Gleichungen (2.5) und (2.6) berechnen. Zum anderen kann man das Plasma quasi-neutral aufsetzen, so dass die Teilchen zu Beginn keine Felder erzeugen. Die Felder auf dem Gitter müssen dann mit Null initialisiert werden. Im Folgenden sollen beide Möglichkeiten genauer betrachtet werden.

Sind die Teilchenpositionen (sowie die Historie der Teilchen) bekannt, so lassen sich die zugehörigen Felder nach Gleichungen (2.5) und (2.6) berechnen. Um die Felder auf dem Gitter zur Zeit $t = 0$ richtig zu initialisieren, werden alle Werte zunächst auf Null gesetzt. Danach müssen die einzelnen Gitterzellen der Reihe nach durchgegangen werden. Da auf dem Gitter nur Fernfelder gespeichert werden, muss für jede Zelle festgestellt werden, ob sie sich im Nahfeldbereich eines Teilchens befindet. Für Gitterzellen im Fernfeld eines Teilchens werden die Felder am Ort der Gitterzelle nach den Gleichungen (2.5) und (2.6) berechnet und zu den Feldern auf der Gitterzelle hinzuaddiert. Nachdem alle Gitterzellen auf die beschriebene Art initialisiert worden sind, ist das Fernfeld auf dem Gitter korrekt initialisiert und die Simulation kann starten. Der Nachteil der beschriebenen Methode ist, dass ein sehr großer Rechenaufwand für die Initialisierung des Gitters erforderlich ist. Dafür können die Anfangspositionen der Teilchen allerdings völlig beliebig festgelegt werden.

Eine andere Möglichkeit ist es, das Plasma gezielt so aufzusetzen, dass die Fernfelder am Anfang verschwinden und das Gitter mit Null initialisiert werden kann. Ordnet man positive und negative Ladungen nahe beieinander

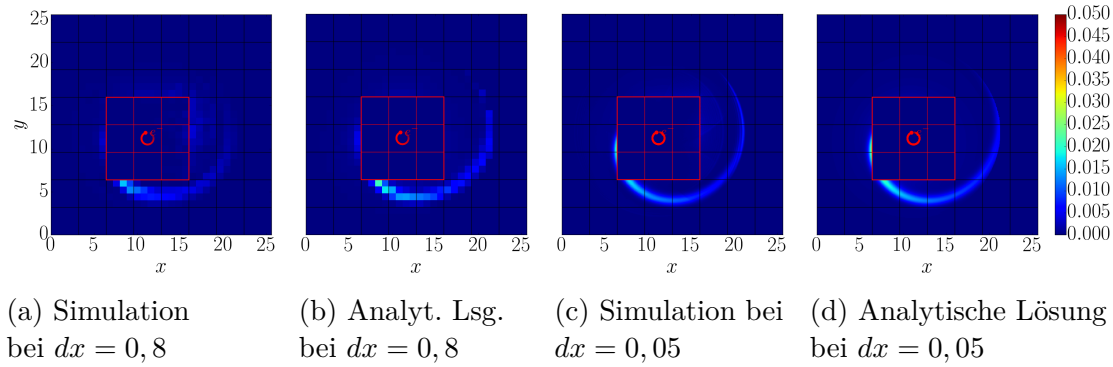


Abbildung 3.11: Hybride Simulation mit zwei verschiedenen Gitterauflösungen dx im Vergleich mit der exakten (Liénard-Wiechert) Lösung. Hierbei wurde die Gyration eines Elektrons in einem konstanten Magnetfeld $B_z = 1$ bei einer Energie von $\gamma = 1,1$ simuliert. Hieraus ergibt sich eine Gyrationfrequenz von $\omega_g = e|B_z|/(\gamma m_e) = 0.9$. Die Farbskala bezeichnet $|\vec{E}|^2$ des Fernfeldes. \vec{E} und $c\vec{B}$ in Einheiten $4\pi\epsilon_0 m_e^2 c^4 / e^3 = 1.77 \cdot 10^{20} \text{ V/m}$, Längen in Einheiten $e^2 / (4\pi\epsilon_0 m_e c^2) = 2.82 \cdot 10^{-15} \text{ m}$, Zeiten in Einheiten $e^2 / (4\pi\epsilon_0 m_e c^3) = 9.40 \cdot 10^{-24} \text{ s}$.

an, so dass sich eine Gesamtladung von Null ergibt, können die Fernfelder dieser Ladungsverteilung vernachlässigt werden. Das gesamte Gitter kann mit Null initialisiert werden.

Es ist auch möglich, wie in Abschnitt 2.5.1 beschrieben, nur eine Art von Teilchen in der Simulation zu verwenden und die Fernfelder der Teilchen zur Zeit $t = 0$ durch ein statisches Hintergrundfeld zu kompensieren. Die Felder auf dem Gitter müssten in diesem Fall so initialisiert werden, dass sie im Fernfeldbereich (aller Teilchen) das Hintergrundfeld genau kompensieren. In diesem Bereich kann das Gitter somit direkt mit dem negativen Hintergrundfeld initialisiert werden. An Stellen, welche im Nahfeldbereich *aller* Teilchen liegen, ist das Gitter mit Null zu initialisieren. Sollten die Teilchen nicht so positioniert sein, dass sie alle in einem gemeinsamen Nahfeldbereich liegen, sind die noch verbleibenden Zellen wie oben beschrieben mit den Feldern nach Gleichungen (2.5) und (2.6) zu initialisieren.

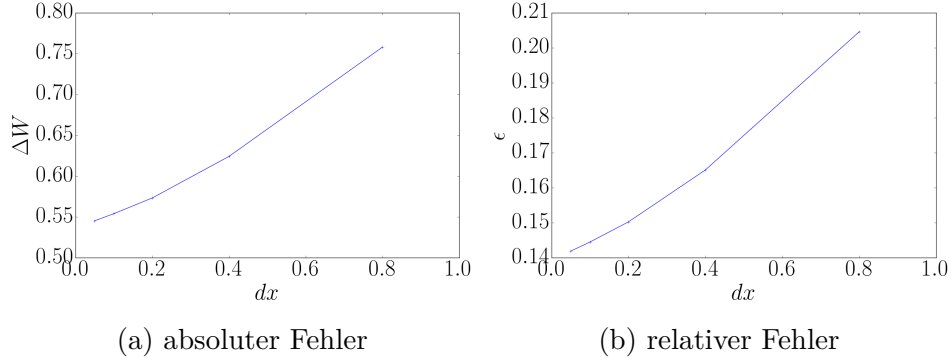


Abbildung 3.12: Konvergenz der hybriden Simulation gegen die Liénard-Wiechert-Lösung mit kleiner werdender Gitterkonstanten dx . Als Fehlermaß wird die Differenz der gesamten Feldenergie des Fernfeldes ΔW in Einheiten von $m_e c^2$ verwendet. $\epsilon = \Delta W/W$ ist der relative Fehler. Die gesamte Feldenergie der Fernfelder beträgt $W = 3.84 m_e c^2$. Die Gitterkonstante dx ist in Einheiten von $e^2/(4\pi\epsilon_0 m_e c^2) = 2.82 \cdot 10^{-15} \text{m}$ angegeben.

3.3 Vergleich mit PIC-Simulationen

Nun soll die hier entwickelte hybride Methode mit der sehr verbreiteten Particle-In-Cell (PIC)-Methode verglichen werden. Im Folgenden werden die Grundlagen der PIC-Methode vorgestellt, ohne in die Details zu gehen. Anhand eines einfachen Streuproblems wird gezeigt, unter welchen Bedingungen PIC und die hier entwickelte Molekuldynamik zu unterschiedlichen Ergebnissen führen und unter welchen Bedingungen beide Methoden die gleichen Ergebnisse liefern.

3.3.1 Das Particle-In-Cell-Verfahren

Um den Rechenaufwand für Plasmasimulationen zu reduzieren, werden oft Particle-In-Cell-Methoden verwendet [3, 10]. Die Bewegung der Teilchen bei gegebenen Feldern wird durch (2.1) und (2.2) bestimmt und kann mit einer der in Abschnitt 2.2 beschriebenen Methoden berechnet werden. Die Dynamik der Felder wird durch die inhomogenen Maxwell-Gleichungen bestimmt

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \vec{E} &= \rho, & \nabla \times \vec{E} &= -\partial_t \vec{B}, \\ \nabla \cdot \vec{B} &= 0, & \nabla \times \vec{B} &= +\partial_t \vec{E} + \vec{j}. \end{aligned} \quad (3.35)$$

Die Integration der Maxwell-Gleichungen erfolgt numerisch auf einem Gitter. Für die Beschreibung der Ladungs- und Stromdichten werden Quasiteilchen eingeführt, die sich über mehrere Gitterzellen des Gitters erstrecken. Zwischen der Größe der Gitterzellen und der Ausdehnung der Quasiteilchen besteht im Gegensatz zu der hier entwickelten hybriden Methode eine feste Beziehung. Eine Besonderheit der Quasiteilchen bei der PIC-Methode ist deren endliche Ausdehnung, die dazu führt, dass die Wechselwirkung zwischen Quasiteilchen für kleine Abstände fehlerhaft wird. Im Gegensatz zu der hier vorgestellten hybriden Methode erfolgt keine analytische Berechnung der zu den Quasielementen gehörenden elektromagnetischen Felder. Vielmehr deponieren die Quasiteilchen Ladungs- und Stromdichten auf dem Gitter. Durch stromerhaltende Integration der inhomogenen Maxwell-Gleichungen auf dem Gitter [7] werden die zu den Quasiteilchen gehörenden Felder ermittelt. Da die Felder für den gesamten Raum auf einem Gitter gespeichert sind, müssen sie *nicht* mit (2.5) und (2.6) berechnet werden, um ein Teilchen zu pushen. Für eine große Anzahl N an Teilchen kann der Rechenaufwand somit drastisch verringert werden.

3.3.2 Vergleich der Streuung zweier Teilchen mit PIC und hybridem Verfahren

Es soll aufgezeigt werden, inwieweit sich PIC und hybride Simulationen in ihren Ergebnissen unterscheiden. Für Teilchen mit einem genügend großen Abstand voneinander macht es für deren Dynamik keinen Unterschied, ob diese als Punktteilchen oder als ausgedehnte Ladungsverteilungen angesehen werden. Bei hochenergetischen Stoßprozessen, bei denen sich die Teilchen jedoch bis auf eine Distanz in der Größenordnung der Gitterkonstanten annähern, gibt es einen großen Unterschied in der Dynamik zwischen Punktteilchen und ausgedehnten Ladungsverteilungen.

Um dies zu verdeutlichen, simulieren wir die Streuung zweier Elektronen mit beiden Methoden. In den Simulationen untersuchen wir den Streuwinkel in Abhängigkeit vom Stoßparameter b . Hierzu werden eine Reihe von Simulationen mit unterschiedlichen Stoßparametern durchgeführt. Bei niederenergetischer Streuung ist für beide Methoden das gleiche Resultat zu erwarten. Bei hochenergetischer Streuung und kleinem Stoßparameter jedoch sollte es große Unterschiede geben. Es ist zu erwarten, dass die endliche Größe der Quasiteilchen in den PIC-Simulationen Auswirkungen auf den Streuwinkel

hat, weil sich die Quasiteilchen in der PIC-Methode gegenseitig durchdringen können. Dies ist für die Punktteilchen der hier vorgestellten hybriden Methode nicht möglich. In Abbildung 3.13 ist die simulierte Abhängigkeit des Streuwinkels θ vom Stoßparameter b für beide Methoden dargestellt. Be-

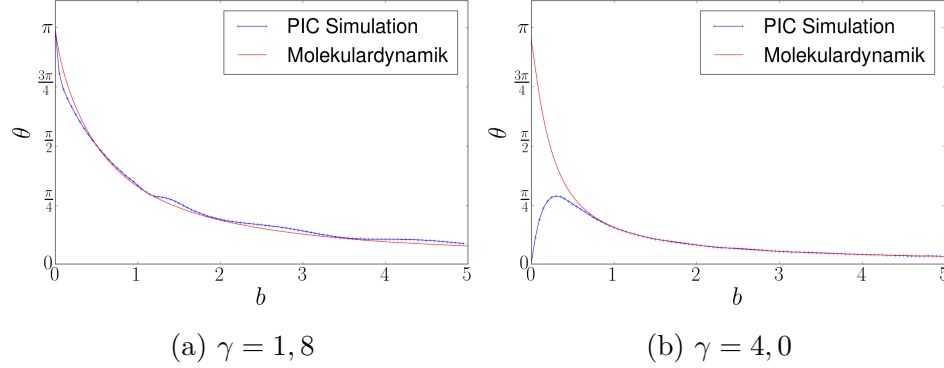


Abbildung 3.13: Abhängigkeit des Streuwinkels θ vom Stoßparameter a bei der e^-e^- -Streuung. Der Stoßparameter ist in Einheiten von $e^2/(m_e c^2)$ angegeben.

sonders deutlich ist der Unterschied zwischen PIC und hybrider Methode bei einem frontalen Stoß ($b = 0$) der Elektronen zu erkennen. Für Punktteilchen findet wie zu erwarten Rückstreuung statt. Das Verhalten der Quasiteilchen in den PIC-Simulationen zeigt jedoch, dass diese sich wechselseitig durchdringen und nur wenig aneinander gestreut werden.

Insgesamt kann festgehalten werden, dass PIC- und hybride Simulationen von Punktteilchen dann übereinstimmen, wenn der Abstand der Teilchen groß gegenüber der Ausdehnung der Quasiteilchen in den PIC-Simulationen ist. Die Ausdehnung der Quasiteilchen bei PIC kann durch Wahl eines feineren Gitters reduziert werden, wodurch die PIC und hybriden Simulationstechniken länger übereinstimmen. Dieses Verfahren induziert im Falle von PIC jedoch sehr schnell sehr hohe Simulationskosten. In dem hier vorgestellten hybriden Modell ist es jedoch nicht nötig, die Auflösung des Gitters zu erhöhen.

3.3.3 Weitere Unterschiede zum PIC-Verfahren

Zum Abschluss des Vergleichs des hier entwickelten hybriden Verfahrens mit der PIC-Methode sollen noch einige weitere Punkte aufgezeigt werden um

ein vollständigeres Bild zu vermitteln. Es muss erwähnt werden, dass in PIC-Simulationen die Wechselwirkung bei kleinen Abständen durch das MicPIC-Verfahren [26, 21] stark verbessert werden kann. Hierzu wird die Wechselwirkung zwischen nahe benachbarten Teilchen um die Coulombwechselwirkung von Punktteilchen ergänzt. Somit ist ein gegenseitiges Durchdringen der Quasiteilchen bei einem frontalen Stoß wie oben dargestellt ausgeschlossen. Dieses Verfahren weist jedoch auch Schwächen auf. So wird die Wechselwirkung bei kleinen Abständen durch Coulombpotentiale beschrieben, was in der Simulation hochenergetischer Streuung – wie allgemein bekannt ist – den nicht-relativistischen Wirkungsquerschnitt gemäß der rutherfordschen Streuformel ergibt. Dieses Problem ließe sich allerdings lösen, da das MicPIC-Verfahren allem Anschein nach relativ leicht dahingehend erweitert werden kann, dass bei kleinen Abständen in der Simulation anstelle der Coulombwechselwirkung die relativistische Wechselwirkung gemäß Gleichungen (2.5) und (2.6) verwendet wird.

Größere Probleme ergeben sich bei der Berechnung der Felder auf dem Gitter. Ein Teilchen p erzeugt auch in seiner unmittelbaren Nähe Felder auf dem Gitter. Bei der molekulardynamischen Wechselwirkung mit einem sich in der Nähe befindlichen Teilchen q muss beachtet werden, dass dennoch auch über die Felder auf dem Gitter eine Interaktion stattfindet. Im Gegensatz dazu befinden sich bei dem in dieser Arbeit vorgestellten Verfahren die von einem Teilchen p erzeugten Felder in dessen Umgebung selbst explizit nicht auf dem Gitter, so dass die Wechselwirkung mit einem benachbarten Teilchen q ausschließlich analytisch durch die Felder (2.5) und (2.6) beschrieben wird. Durch das explizite Ausnehmen der eigenen Felder eines Teilchens auf dem Gitter in dessen Nahfeldbereich, kann der Bereich in dem die molekulardynamische Wechselwirkung analytisch beschrieben wird beliebig groß gewählt werden, was bei dem MicPIC-Verfahren nicht der Fall ist. Das Erzeugen von Feldern eines Teilchens in dessen unmittelbarer Nähe auf dem Gitter führt zudem zu dem Problem der Rückwechselwirkung dieser Felder auf das erzeugende Teilchen selbst. Die hierdurch entstehende Selbstkraft kann als numerisches Artefakt aufgefasst werden und entspricht a priori nicht der Selbstkraft nach Gleichung (1.31) bzw. (1.32).

Bei dem in dieser Arbeit vorgestellten Verfahren haben die von einem Teilchen p erzeugten Felder auf dem Gitter keinen Einfluss auf dieses Teilchen selbst. Das Gitter dient lediglich der numerischen Lösung der Maxwell-Gleichungen mittels des FDTD-Verfahrens und steht in keinerlei Zusammenhang zu der Form der Teilchen. Der Maxwell-Solver ist unabhängig von den

Teilchen und das FDTD-Verfahren kann ohne Weiteres durch jedes beliebige andere numerische Verfahren zur Lösung der Feldgleichungen ausgetauscht werden. Die Felder entstehen durch entsprechendes Setzen der Randwerte für den Maxwell-Solver. Für die Berechnung dieser Randwerte werden die Formeln (2.5) und (2.6) verwendet, was den Feldern von tatsächlichen Punktquellen entspricht. Auch diese Formeln sind prinzipiell ohne weiteres austauschbar, was dieses Verfahren im Vergleich zum PIC-Verfahren deutlich flexibler und auf ein breites Feld physikalischer Probleme anwendbar macht.

3.4 Laufzeit

Nun soll der Rechenaufwand für hybride Simulationen untersucht und mit PIC verglichen werden. Die erforderlichen Rechenschritte für die Propagation der Felder und Teilchen um einen Zeitschritt Δt sind in Tabelle 3.1 gegenübergestellt. Im Gegensatz zum PIC muss der hybride Code die Felder an den Grenzflächen der Nahfeldbereiche berechnen. Hierfür sind Auswertungen der Liénard-Wiechert-Felder (2.5) und (2.6) nötig. Weitere Auswertungen sind erforderlich, wenn sich der Nahfeldbereich eines Teilchens verschiebt. Der Mehraufwand im hybriden Code im Vergleich zum PIC besteht zum überwiegenden Teil aus diesen Auswertungen¹. Die Anzahl der pro Zeitschritt nötigen Auswertungen der Liénard-Wiechert-Felder soll genauer untersucht werden.

3.4.1 Liénard-Wiechert-Auswertungen pro Zeitschritt

Die einzelnen Schritte aus Tabelle 3.1, für die Liénard-Wiechert-Felder ausgewertet werden, sollen im Folgenden genauer betrachtet werden.

Der erste Schritt in Tabelle 3.1, in dem Liénard-Wiechert-Felder berechnet werden müssen, ist das Setzen der Randbedingungen an den Nahfeld-Grenzen direkt bevor das B -Feld gepusht wird. An der Grenze des Nahfeldbereichs eines Teilchens muss dessen B -Feld berechnet werden. Der Nahfeldbereich eines Teilchens besteht aus 27 Boxen mit einer Seitenlänge von b Gitterzellen. Die Grenzfläche des Nahfeldbereichs umfasst somit $6 \times 9 \times b^2$

¹Der Vollständigkeit halber soll hier noch erwähnt werden, dass Berechnung von Strömen, wie sie im PIC nötig ist, im hybriden Code entfällt. Dies verringert den Aufwand des hybriden Codes gegenüber einem PIC-Code. In der Regel ist die Berechnung von Strömen jedoch „sehr billig“, so dass der gesparte Aufwand relativ klein ist.

PIC	Hybrid
Push E ($t \rightarrow t + \frac{\Delta t}{2}$) <i>YEE-Push</i>	Push E ($t \rightarrow t + \frac{\Delta t}{2}$) <i>Berechne B an Grenzen</i> <i>YEE-Push</i>
Push B ($t \rightarrow t + \frac{\Delta t}{2}$) <i>YEE-Push</i>	Push B ($t \rightarrow t + \frac{\Delta t}{2}$) <i>Berechne E an Grenzen</i> <i>YEE-Push</i>
Push Particles <i>Feld von Gitter nehmen</i>	Push Particles <i>Feld von Gitter nehmen</i> <i>Nahfelder berechnen</i>
Strom berechnen	
Push B ($t + \frac{\Delta t}{2} \rightarrow t + \Delta t$) <i>YEE-Push</i>	Push B ($t + \frac{\Delta t}{2} \rightarrow t + \Delta t$) <i>Berechne E an Grenzen</i> <i>YEE-Push</i>
Push E ($t + \frac{\Delta t}{2} \rightarrow t + \Delta t$) <i>YEE-Push</i>	Push E ($t + \frac{\Delta t}{2} \rightarrow t + \Delta t$) <i>Berechne B an Grenzen</i> <i>YEE-Push</i>
	Update NF^a-Region

^aNahfeld

Tabelle 3.1: Gegenüberstellung der einzelnen Schritte im PIC-Code und im hybriden Code, um das System einen Zeitschritt dt zu pushen

Gitterzellen. In allen Gitterzellen dieser Grenzfläche muss das B -Feld des Teilchens berechnet werden, wodurch $6 \times 9 \times b^2$ Auswertungen der Liénard-Wiechert-Felder erforderlich sind. Es ist zu beachten, dass an den sechs Seiten der Oberfläche des Nahfeldbereichs jeweils nur eine Komponente des B -Feldes ausgewertet werden muss und daher die Tatsache, dass das Gitter gestagert ist, nicht zu mehr Auswertungen führt.

Dies gilt analog für das Setzen der Randbedingungen bevor das E -Feld gepusht wird. An der Grenze des Nahfeldbereichs eines Teilchens muss auch dessen E -Feld berechnet werden. Somit sind auch hier wieder $6 \times 9 \times b^2$ Auswertungen der Liénard-Wiechert-Felder nötig.

Wenn ein Teilchen über eine Boxgrenze hinweg gepusht worden ist, verschiebt sich sein Nahfeldbereich und die Felder auf dem Gitter müssen entsprechend angepasst werden. Hierbei sind drei Fälle zu unterscheiden.

Ist der neue Nahfeldbereich in nur einer Raumdimension gegenüber dem vorherigen verschoben, so verlassen 9 Boxen den Nahfeldbereich und ebenfalls 9 Boxen kommen zum Nahfeldbereich hinzu (vgl. Bild 3.14a). Die Felder müssen somit in 18 Boxen neu gesetzt werden. Jede Box enthält b^3 Gitterzellen. Es müssen die Liénard-Wiechert-Felder in insgesamt $18 \times b^3$ Zellen berechnet werden. Da in einem versetzten (staggered) Gitter die Positionen für die 6 Komponenten des Feldes gegeneinander versetzt sind, muss jede Komponente einzeln ausgewertet werden. Es sind also $6 \times 18 \times b^3$ Auswertungen der Liénard-Wiechert-Felder nötig. Ist der neue Nahfeldbereich in zwei Raumdimensionen gegenüber dem alten versetzt, so verlassen 15 Boxen den Nahfeldbereich und ebenfalls 15 Boxen kommen zum Nahfeldbereich hinzu (vgl. Bild 3.14b). Die Felder müssen somit in 30 Boxen angepasst werden. Es sind dann insgesamt $6 \times 30 \times b^3$ Auswertungen der Liénard-Wiechert-Felder nötig. Ist der neue Nahfeldbereich in allen drei Raumdimensionen gegenüber dem alten versetzt, so verlassen 19 Boxen den Nahfeldbereich und ebenfalls 19 Boxen kommen zum Nahfeldbereich hinzu. Die Felder müssen somit in 38 Boxen angepasst werden. Es sind dann insgesamt $6 \times 38 \times b^3$ Auswertungen der Liénard-Wiechert-Felder nötig.

Die Zahl der Nahfeldauswertungen, um ein Teilchen zu pushen, hängt von der Anzahl von Nachbarteilchen ab, welche sich im Nahfeld befinden. Hat das Teilchen i N_i weitere Teilchen in seinem Nahfeldbereich, müssen somit N_i Liénard-Wiechert-Auswertungen durchgeführt werden.

Die Anzahl der Liénard-Wiechert-Auswertungen pro Zeitschritt ist in Tabelle 3.2 zusammengefasst. Pro Zeitschritt werden somit im Mittel

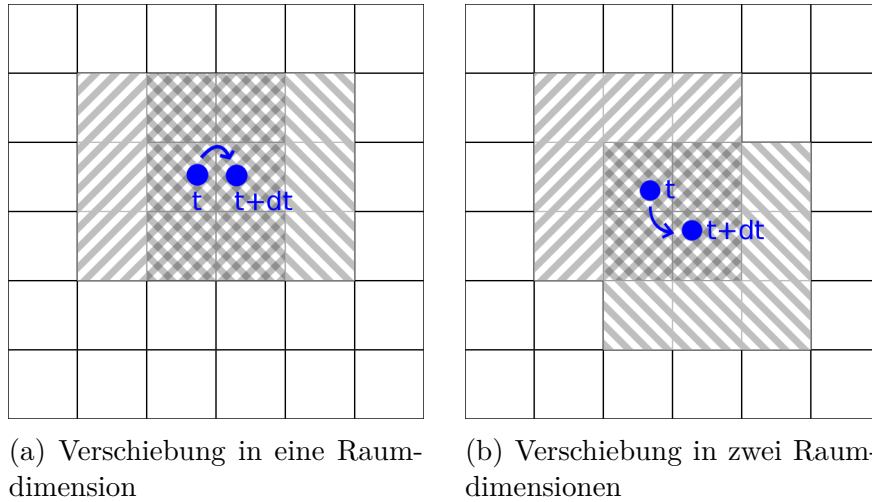


Abbildung 3.14: Wenn ein Teilchen zwischen den Zeitpunkten t und $t + dt$ seine Box wechselt, dann verschiebt sich sein Nahfeldbereich. markiert den Nahfeldbereich zur Zeit t und zur Zeit $t + dt$. Die Punkte zeigen die Position des Teilchens zur Zeit t und $t + dt$.

$$N(216 \times b^2 + 12 \times \alpha \times b^3 + n) \quad (3.36)$$

Liénard-Wiechert-Auswertungen gemacht. Der gesamte Rechenaufwand (computational load) L_H für einen Zeitschritt setzt sich somit zusammen aus der Anzahl der Liénard-Wiechert-Auswertungen multipliziert mit einer Konstante C_1 , plus einer Konstante C_2 für den Aufwand zur Berechnung der Felder auf dem Gitter mittels des FDTD-Solvers, plus der Teilchenzahl N multipliziert mit einer Konstanten C_3 für das Pushen der Teilchen bei bekannten Feldern

$$L_H = \left(C_1 \left(216 \times b^2 + 12 \times \alpha \times b^3 + n \right) + C_3 \right) \times N + C_2, \quad (3.37)$$

wobei C_2 linear vom Volumen des Simulationsgebietes abhängt, während C_1 und C_3 nicht von Letzterem abhängen.

3.4.2 Laufzeitmessung

Es soll nun die Laufzeit größerer Systeme untersucht werden. Ziel der Untersuchung ist die empirische Skalierung der Laufzeit mit der Teilchenzahl

Aktion	Anzahl der LW ^a -Auswertungen
Berechne B an Grenzen ^b	$N \times 6 \times 9 \times b^2$
Berechne E an Grenzen ^b	$N \times 6 \times 9 \times b^2$
Nahfelder berechnen	$N \times n$
Update NF ^c -Region	$N \times 6 \times 2\alpha \times b^3$

^aLiénard-Wiechert

^bmuss 2 mal pro Zeitschritt ausgewertet werden

^cNahfeld

Tabelle 3.2: Anzahl der Feldausswertungen in den einzelnen Teilschritten im hybriden Code

N : Gesamtteilchenzahl

n : durchschnittliche Anzahl an Nachbarn im Nahfeldbereich

b : Seitenlänge einer Box

α : Mittlere Anzahl an Boxen, die pro Zeitschritt den Nahfeldbereich eines Teilchens verlassen

N . Für alle Simulationen soll die Plasmadichte gleich sein und durchschnittlich einem Teilchen pro Box entsprechen. Die Größe einer Box ist in allen Simulationen gleich und beträgt $b = 4$. Da die Plasmadichte bei den untersuchten Simulationen konstant gehalten werden soll, muss mit zunehmender Teilchenzahl auch das Volumen des Simulationsgebietes vergrößert werden. Die Anfangspositionen und -geschwindigkeiten der Teilchen werden zufällig gewählt. Nach Gleichung (3.37) sind die Parameter b , α und n unter den hier gemachten Annahmen unabhängig von der Teilchenzahl N . Da C_2 linear vom Volumen des Simulationsgebiets abhängt und das Verhältnis Teilchenzahl zu Simulationsvolumen konstant gehalten wird, hängt C_2 linear von der Teilchenzahl N ab. In Abbildung 3.15 ist die für eine Simulation benötigte Zeit in Abhängigkeit von der Teilchenzahl N für einige Beispielsimulationen aufgetragen. Die Anzahl simulierter Zeitschritte ist für alle Simulationen gleich. Die lineare Skalierung des Rechenaufwandes mit der Teilchenzahl N ist für die hybride Simulation deutlich zu erkennen.

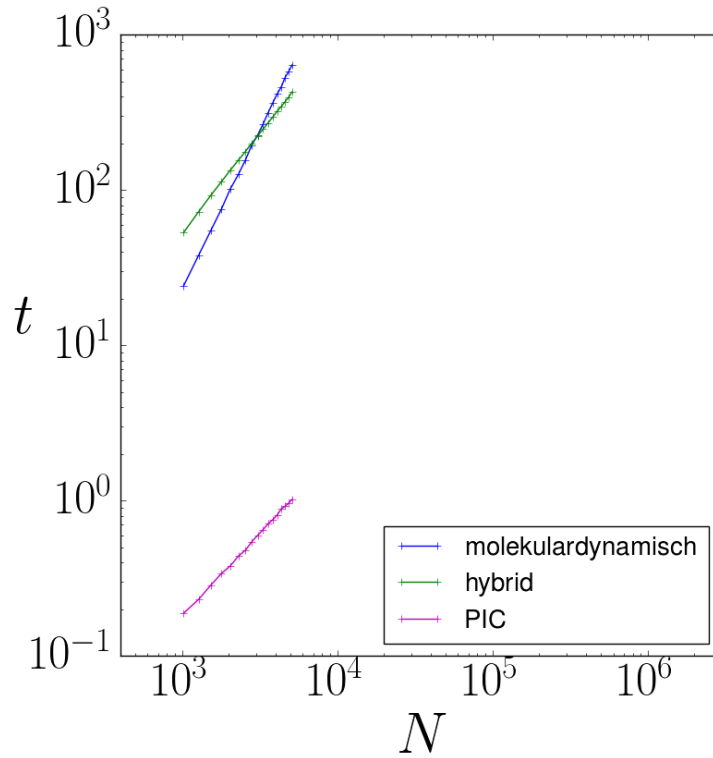


Abbildung 3.15: Laufzeit t der Simulationen in Sekunden in Abhängigkeit der Teilchenzahl N . Der numerische Aufwand der hybriden Simulation und der PIC-Simulation skaliert linear mit der Teilchenzahl N . Der Aufwand der molekulardynamischen Simulation hingegen skaliert quadratisch.

3.4.3 Beispiel: Rechenaufwand bei der Zwei-Teilchen-Streuung

Als weiteres Beispiel soll die Streuung von 2 Teilchen bei $\gamma = 1.1$ simuliert werden. Die Simulation wird insgesamt dreimal durchgeführt. Einmal mit einem Standard-PIC-Verfahren und zweimal mit dem hybriden Verfahren. Bei den beiden hybriden Simulationen werden zwei unterschiedliche Größen für die Boxen und somit auch für die Nahfeldbereiche gewählt. In allen drei Simulationen hat das Gitter $128^3 \approx 2 \times 10^6$ Zellen bei einem Gitterabstand $\Delta x = 0.2$. Es werden jeweils 300 Zeitschritte mit Schrittweite $\Delta t = 0.1$ simuliert. Abbildung 3.16a zeigt die PIC-Simulation. In Abbildung 3.16b ist die hybride Simulation mit einem großen Nahfeldbereich gezeigt. Die Kantenlän-

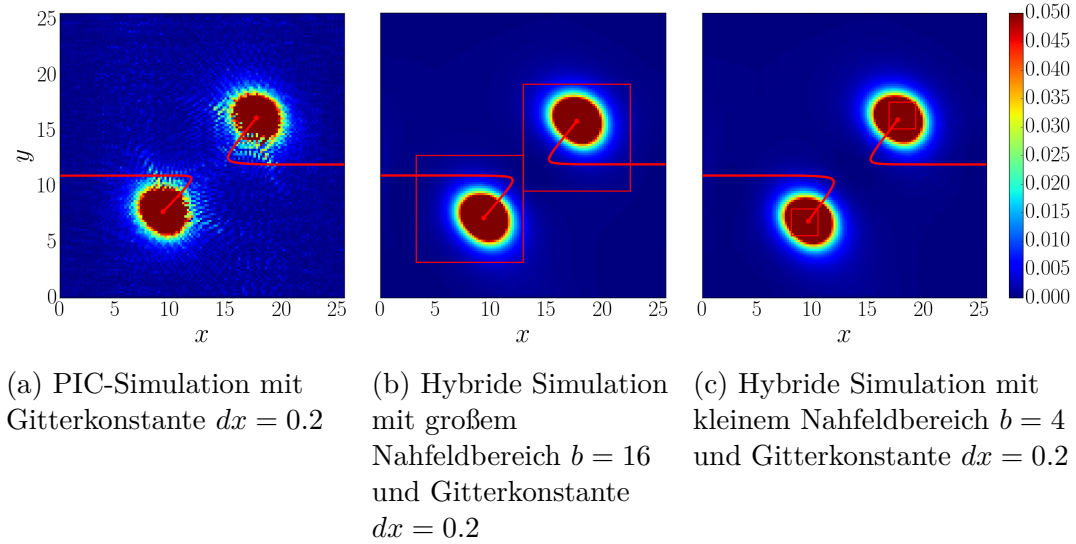


Abbildung 3.16: Vergleich von PIC-Simulation mit dem hybriden Modell anhand von e^-e^- -Streuung bei $\gamma = 1.1$ und Stoßparameter $b = 1$. $|\vec{E}|^2$ ist zur Zeit $t = 27$ abgebildet. \vec{E} und $c\vec{B}$ in Einheiten $4\pi\epsilon_0 m_e^2 c^4 / e^3 = 1.77 \cdot 10^{20} \text{ V/m}$, Längen in Einheiten $e^2 / (4\pi\epsilon_0 m_e c^2) = 2.82 \cdot 10^{-15} \text{ m}$, Zeiten in Einheiten $e^2 / (4\pi\epsilon_0 m_e c^3) = 9.40 \cdot 10^{-24} \text{ s}$.

ge einer Box ist $b = 16$. Dies entspricht einer Kantenlänge von 48 Zellen für den Nahfeldbereich. Die letzte Abbildung 3.16c zeigt ebenfalls eine hybride Simulation. Hier beträgt die Kantenlänge einer Box allerdings nur $b = 4$ und die Kantenlänge des Nahfeldbereichs somit 12 Zellen. Der Nahfeldbereich ist in den Abbildungen durch ein Rechteck um das jeweilige Teilchen markiert. Die Gesamtfelder innerhalb des Nahfeldbereiches sind lediglich für die Abbildung berechnet worden. Die in Abschnitt 3.4.1 beschriebenen Größen für diese Simulation sind in Tabelle 3.3 zusammengetragen. Bei der Simulation mit der Boxgröße $b = 16$ hat ein Teilchen im Mittel ca. $n = 0.3$ Nachbarpartikel während der gesamten Simulationszeit in seinem Nahfeldbereich, für welchen die molekulardynamische Wechselwirkung berechnet werden muss. Bei der Simulation mit der Boxgröße $b = 4$ hingegen ist der Nahfeldbereich so klein, dass die Teilchen in dieser Simulation nie in den Nahfeldbereich des anderen Teilchens kommen. Bei der Simulation mit der Boxgrößen $b = 4$ kommt im Schnitt ca. alle zwei Simulationsschritte eine weitere Box pro Teilchen zum Nahfeldbereich hinzu, und eine andere verlässt diesen ($\alpha = 0.535$).

	großer Nahfeldbereich	kleiner Nahfeldbereich
b	16	4
n	≈ 0.3	0
α	0.135	0.535
LWpTpZ ^a	$\approx 6.2 \times 10^4$	$\approx 3.9 \times 10^3$

^aLiénard-Wiechert-Auswertungen pro Teilchen pro Zeitschritt

Tabelle 3.3: Parameter zweier Beispielsimulationen

b Seitenlänge einer Box

n Durchschnittliche Anzahl an Nachbarn im Nahfeldbereich

α Mittlere Anzahl an Boxen, die pro Zeitschritt den Nahfeldbereich eines Teilchens verlassen

Bei der Simulation mit $b = 16$ passiert das nur ca. alle sieben Zeitschritte ($\alpha = 0.135$). Dafür ist jedoch die Anzahl der Gitterzellen einer Box 64-mal so groß. Insgesamt ist die Anzahl der Liénard-Wiechert-Auswertungen deshalb bei der Simulation mit $b = 16$ um eine Größenordnung höher im Vergleich zu der Simulation mit $b = 4$. Insgesamt sollte der Nahfeldbereich also möglichst klein gehalten werden, damit er eine möglichst kleine Grenzfläche hat, auf der die Feldwerte nach Liénard-Wiechert berechnet werden müssen. Die Anzahl der Nachbarn im Nahfeldbereich reduziert sich ebenfalls mit der Größe des Nahfeldbereichs.

Wie anhand von Abbildung 3.16 schon mit bloßem Auge erkennbar ist, führt das hybride Modell bei gleicher Gitterauflösung zu wesentlich glatteren Feldern auf dem Gitter. Zum Vergleich ist in Abbildung 3.17 die PIC-Simulation nochmals bei doppelt so hoher Auflösung gezeigt. In Tabelle 3.4 sind nochmal einige Daten aller vier Simulationen zusammengetragen.

3.5 Parallelisierung des hybriden Verfahrens

Um eine große Anzahl an Teilchen simulieren zu können, muss das hybride Simulationsverfahren parallelisiert werden. In diesem Abschnitt soll gezeigt werden, wie sich die Simulation auf mehrere parallele Prozesse aufteilen lässt. Wie bereits in Abschnitt 3.2.1 dargestellt, wird das gesamte Simulationsgebiet in Boxen aufgeteilt. Jedem Prozess wird im Anschluss ein begrenztes Plasmavolumen bestehend aus $n_{xb} \times n_{yb} \times n_{zb}$ Boxen zugeordnet. Eine beispielhafte Aufteilung des Plasmavolumens auf neun parallele Prozesse mit $n_{xb} = n_{yb} = n_{zb} = 7$ ist in Abbildung 3.18

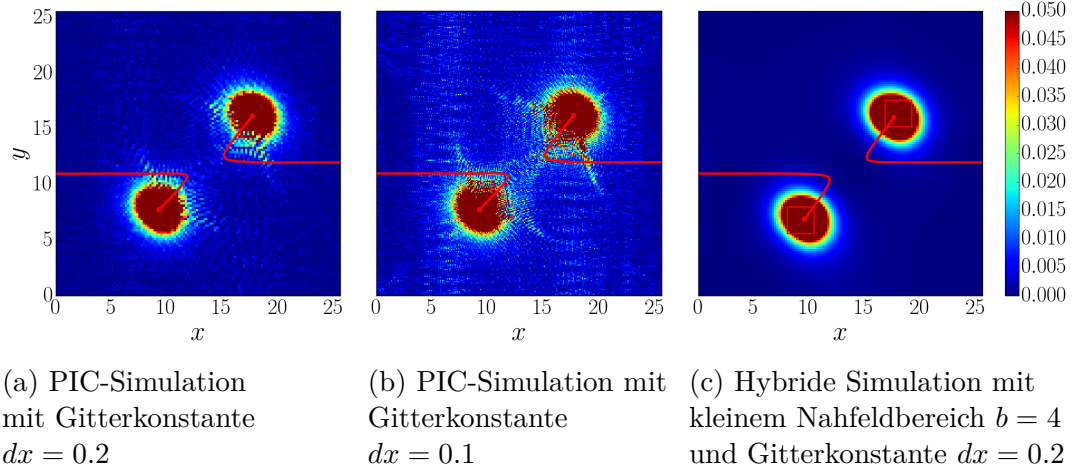


Abbildung 3.17: Vergleich von PIC-Simulation mit dem hybriden Modell anhand von e^-e^- -Streuung bei $\gamma = 1.1$ und Stoßparameter $b = 1$. $|\vec{E}|^2$ ist zur Zeit $t = 27$ abgebildet. \vec{E} und $c\vec{B}$ in Einheiten $4\pi\epsilon_0 m_e^2 c^4 / e^3 = 1.77 \cdot 10^{20} \text{ V/m}$, Längen in Einheiten $e^2 / (4\pi\epsilon_0 m_e c^2) = 2.82 \cdot 10^{-15} \text{ m}$, Zeiten in Einheiten $e^2 / (4\pi\epsilon_0 m_e c^3) = 9.40 \cdot 10^{-24} \text{ s}$.

aufgezeigt.

Im Folgenden wird erklärt, welche Daten jeder parallele Prozess benötigt und welche Daten zwischen Letzteren ausgetauscht werden müssen. Um ein Teilchen zu pushen, muss die Liénard-Wiechert-Wechselwirkung zwischen ihm und allen übrigen Teilchen innerhalb seines Nahfeldbereiches berechnet werden. Dazu benötigt jeder parallele Prozess die Daten sämtlicher Teilchen, die sich aktuell in seinem Prozessvolumen befinden. Für Teilchen nahe am Rand des Prozessvolumens reicht deren Nahfeldbereich über das Prozessvolumen hinaus. Daher gibt es Boxen im Nahfeldbereich dieser Teilchen, die zu einem angrenzenden Prozessvolumen gehören. Ein Beispiel hierfür ist der Nahfeldbereich des Teilchens P_1 welcher in Abbildung 3.18 schraffiert dargestellt ist.

Im Folgenden soll Prozessvolumen Nr. 5 genauer betrachtet werden. In einem ersten Schritt werden die Weltlinien aller sich im grünen Randbereich des Prozessvolumens Nr. 5 befindender Teilchen an Prozess Nr. 5 übertragen. Damit liegen alle Teilcheninformationen zur Berechnung der Liénard-Wiechert-Felder am Ort aller sich im Prozessvolumen Nr. 5 befindender Teilchen nach dem bereits bekannten Schema vor. In einem zweiten Schritt müssen die Felder auf dem Gitter betrachtet werden. Um Prozess Nr. 5 alle benötigten Feldwerte zur Verfügung zu stellen, wird ein zweiter Randbereich zum Austausch von Feldinformationen um das Prozessvo-

	PIC 1	PIC 2	hybrid 1	hybrid 2
Gitterabstand dx	0, 2	0, 1	0, 2	0, 2
Schrittweite dt	0.1	0.05	0.1	0.1
Gitterzellen	128^3	256^3	128^3	128^3
Zellen im NF ^a -Bereich	—	—	$(3 \times 16)^3$	$(3 \times 4)^3$
Simulation bis	$t = 30$	$t = 30$	$t = 30$	$t = 30$
Anzahl Zeitschritte	300	600	300	300
Yee-Pushes	$\approx 1.3 \times 10^9$	$\approx 2.0 \times 10^{10}$	$\approx 1.3 \times 10^9$	$\approx 1.3 \times 10^9$
LW ^b -Auswertungen	0	0	3.7×10^7	2.3×10^6

^aNahfeld^bLiénard-Wiechert

Tabelle 3.4: Einige Werte der vier Beispielsimulationen

lumen Nr. 5 gelegt. In diesen Randbereich werden die Feldwerte aller angrenzenden überlappenden Prozessvolumina übertragen. Zusätzlich müssen die Feldwerte im vorliegenden Beispiel um die Liénard-Wiechert-Felder der Teilchen P_{12} , P_{14} und P_{15} , wie in Abschnitt 3.2.1 beschrieben, korrigiert werden. Das Verschieben des Nahfeldbereiches eines Teilchens, wie in Abschnitt 3.2.2 beschrieben, stellt kein Problem dar.

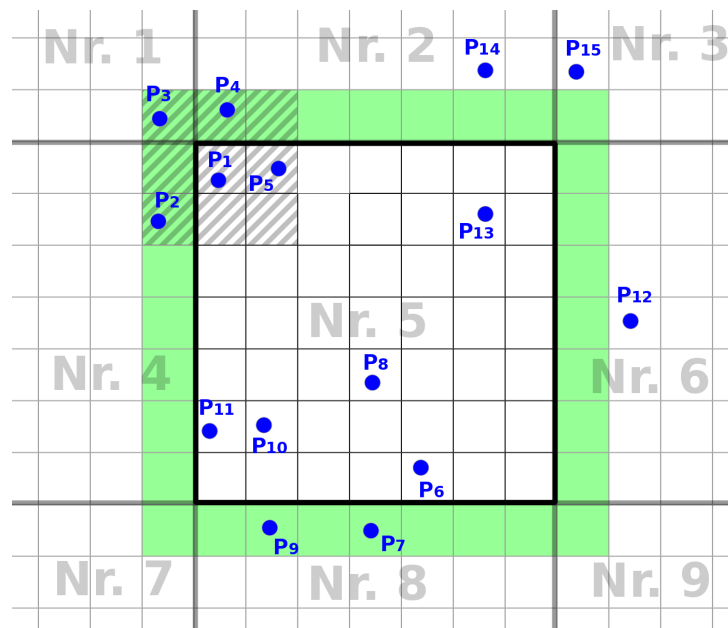


Abbildung 3.18: Aufteilung der Simulation auf mehrere Prozesse mit den Nummern 1 bis 9.

Kapitel 4

Strahlung und Photonen

In diesem Kapitel sollen die von den Teilchen abgestrahlten elektromagnetischen Wellen genauer betrachtet werden. Dazu wird eine Formel zur Berechnung des klassischen Frequenzspektrums der emittierten Strahlung angegeben. Diese Formel ergibt sich im Wesentlichen aus der Fourier-Transformation der Liénard-Wiechert-Felder (2.5) und (2.6) in Fernfeldnäherung [12]. Des Weiteren wird eine quantenmechanische Formel für das Photonenspektrum der Emission nach Ritus und Nikishov [19] diskutiert. Zur Veranschaulichung werden beide Formeln auf ein gyrierendes Teilchen in einem homogenen Magnetfeld angewendet. Dabei sollte Synchrotronstrahlung entstehen. Ein weiteres Beispiel ist die Frequenzverteilung der bei Streuprozessen emittierten Strahlung. Es wird die Frequenzverteilung der bei den Streuprozessen emittierten Strahlung untersucht, um abzuschätzen, welcher Anteil Letzterer auf dem in Abschnitt 3.2 eingeführten Gitter propagiert und welcher Anteil auf dem Gitter nicht mehr aufgelöst werden kann. Um hochfrequente Strahlung berechnen zu können, wird das Konzept eines Photons eingeführt.

4.1 Frequenz- und Winkelverteilung klassischer Strahlung

Die in ein Raumwinkelement $d\Omega$ abgestrahlte Energie W kann aus dem E -Feld, welches ein Beobachter unter $d\Omega$ wahrnimmt, berechnet werden [12]:

$$\frac{dW}{d\Omega} = \int_{-\infty}^{\infty} |\vec{A}(t)|^2 dt, \quad \vec{A}(t) = \sqrt{\varepsilon_0 c} [R\vec{E}]_{\text{ret}}. \quad (4.1)$$

Hierbei ist R der Abstand zum Beobachter und \vec{E} das elektrische Feld am Ort des Beobachters. Die Bezeichnung „ret“ an den Klammern bedeutet, dass der Ausdruck

zur retardierten Zeit auszuwerten ist (siehe Abschnitt 1.4.2). In einem folgenden Schritt wird $\vec{A}(t)$ durch seine Fourier-Transformierte $\vec{A}(\omega)$ ersetzt. Die Fouriertransformation ist wie folgt gegeben

$$\vec{A}(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \vec{A}(t) e^{i\omega t} dt, \quad \vec{A}(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \vec{A}(\omega) e^{-i\omega t} d\omega. \quad (4.2)$$

Die in ein Raumwinkelement $d\Omega$ abgestrahlte Energie kann mit Hilfe der Fourier-Transformierten $\vec{A}(\omega)$ wie folgt geschrieben werden

$$\frac{dW}{d\Omega} = \int_{-\infty}^{\infty} |\vec{A}(\omega)|^2 d\omega. \quad (4.3)$$

Die pro Raumwinkelement und Frequenzintervall in Richtung \vec{n} abgestrahlte Energie $I(\omega, \vec{n})$ lautet

$$\frac{dW}{d\Omega} = \int_0^{\infty} \frac{d^2 I(\omega, \vec{n})}{d\omega d\Omega} d\omega, \quad (4.4)$$

wobei gilt

$$\frac{d^2 I}{d\omega d\Omega} = 2 |\vec{A}(\omega)|^2. \quad (4.5)$$

Die Felder können mit Hilfe der Liénard-Wiechert-Formeln (2.5) und (2.6) berechnet werden. Es ergibt sich

$$\vec{A}(\omega) = \sqrt{\frac{e^2}{32\pi^3 \varepsilon_0 c}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega t} \left[\frac{\vec{n} \times [(\vec{n} - \vec{\beta}) \times \dot{\vec{\beta}}]}{(1 - \vec{\beta} \cdot \vec{n})^3} \right]_{\text{ret}} dt. \quad (4.6)$$

Es wird eine neue Integrationsvariable $t' = t - R(t')/c$ eingeführt. Es gilt

$$\vec{A}(\omega) = \sqrt{\frac{e^2}{32\pi^3 \varepsilon_0 c}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega(t' + R(t')/c)} \frac{\vec{n} \times [(\vec{n} - \vec{\beta}) \times \dot{\vec{\beta}}]}{(1 - \vec{\beta} \cdot \vec{n})^2} dt'. \quad (4.7)$$

Es soll angenommen werden, dass sich der Beobachtungsort der Strahlung weit entfernt von dem Raumgebiet befindet, in dem sich das emittierende Teilchen bewegt. In der Folge darf die Fernfeldnäherung $R(t') \approx x - nr(t')$ gemacht werden. Es ergibt sich

$$A(\omega) = \sqrt{\frac{e^2}{32\pi^3 \varepsilon_0 c}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega(t - nr(t)/c)} \frac{\vec{n} \times [(\vec{n} - \vec{\beta}) \times \dot{\vec{\beta}}]}{(1 - \vec{\beta} \cdot \vec{n})^2} dt. \quad (4.8)$$

Für die Frequenz- und Winkelverteilung der von einer bewegten Ladung erzeugten Strahlung im Fernfeld folgt somit

$$\frac{d^2 I}{d\omega d\Omega} = \frac{e^2}{16\pi^3 \varepsilon_0 c} \left| \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\vec{n} \times [(\vec{n} - \vec{\beta}) \times \dot{\vec{\beta}}]}{(1 - \vec{\beta} \cdot \vec{n})^2} e^{i\omega[t - \vec{n} \cdot \vec{r}(t)/c]} dt \right|^2. \quad (4.9)$$

Hierbei bezeichnen \vec{r} die Position der Ladung, $\vec{\beta}$ die Geschwindigkeit, $\dot{\vec{\beta}}$ die Beschleunigung sowie \vec{n} den Normalenvektor in Beobachtungsrichtung. Bei mehreren Teilchen muss die Strahlung der einzelnen Teilchen entsprechend kohärent addiert werden.

4.2 Numerische Berechnung

Zur Berechnung der Frequenzverteilung muss das Integral in Gleichung (4.9) ausgewertet werden. Für die numerische Berechnung soll diese Gleichung im Folgenden in dimensionslosen Einheiten betrachtet werden. Sie lautet

$$\frac{d^2 I}{d\omega d\Omega} = \left| \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\vec{n} \times [(\vec{n} - \vec{\beta}) \times \dot{\vec{\beta}}]}{(1 - \vec{\beta} \cdot \vec{n})^2} e^{i\omega[t - \vec{n} \cdot \vec{r}(t)]} dt \right|^2. \quad (4.10)$$

Die dimensionslosen Einheiten sind in Anhang D erläutert. Für die numerische Berechnung muss die Integration diskretisiert werden. Im Allgemeinen liegen die Daten \vec{r} und $\vec{\beta}$ der einzelnen Teilchen nur zu diskreten Zeitpunkten t_i vor. Für die numerische Auswertung werden drei verschiedene Methoden vorgestellt. Mit jeder dieser Methoden wird die Synchrotronstrahlung eines kreisförmig bewegten Elektrons in einem homogenen Magnetfeld berechnet, um anhand der Ergebnisse die Methoden miteinander vergleichen zu können.

Die einfachste Möglichkeit (4.10) für gegebene diskrete Werte $\vec{r}_i = \vec{r}(t_i)$, $\vec{\beta}_i = \vec{\beta}(t_i)$ und $\vec{n}_i = \vec{n}(t_i)$ zu berechnen, ist es, das Integral durch eine Summe zu ersetzen. Es gilt

$$\frac{d^2 I}{d\omega d\Omega} = \left| \sum_i (t_{i+1} - t_i) \frac{\vec{n}_i \times [(\vec{n}_i - \vec{\beta}_i) \times \dot{\vec{\beta}}_i]}{(1 - \vec{\beta}_i \cdot \vec{n}_i)^2} e^{i\omega[t_i - \vec{n}_i \cdot \vec{r}_i]} \right|^2. \quad (4.11)$$

Für $\dot{\vec{\beta}}_i$ wird hierbei jeweils die mittlere Beschleunigung zwischen den Zeiten t_i und t_{i+1} verwendet

$$\dot{\vec{\beta}}_i = \frac{\vec{\beta}_{i+1} - \vec{\beta}_i}{t_{i+1} - t_i}. \quad (4.12)$$

Eine erste Verbesserung gegenüber (4.11) ist \vec{r} zwischen t_i und t_{i+1} linear zu interpolieren, $\vec{\beta}$ und $\dot{\vec{\beta}}$ als stückweise konstant anzunehmen und (4.10) analytisch zu lösen. Es ergibt sich

$$\frac{d^2 I}{d\omega d\Omega} = \left| \sum_i \frac{\vec{n}_i \times [(\vec{n}_i - \vec{\beta}_i) \times \dot{\vec{\beta}}_i]}{\omega(1 - \vec{\beta}_i \cdot \vec{n}_i)^3} \right. \quad (4.13)$$

$$\left. \times \left(e^{i\omega[t_{i+1} - \vec{n}_i \cdot \vec{r}_{i+1}]} - e^{i\omega[t_i - \vec{n}_i \cdot \vec{r}_i]} \right) \right|^2.$$

Die numerische Berechnung kann weiter verbessert werden, indem quadratische Interpolation verwendet wird. Allerdings werden $\vec{\beta}$ und $\dot{\vec{\beta}}$ wie bei der linearen Interpolation als stückweise konstant angenommen, da diese beiden Werte nicht in der Exponentialfunktion vorkommen. Somit kann durch eine genauere Interpolation dieser beiden Werte keine signifikante Verbesserung erreicht werden. Durch die quadratische Interpolation der Trajektorie erhält man analog zu (4.13) eine nochmals bessere Formel zur Berechnung der Strahlung

$$\frac{d^2 I}{d\omega d\Omega} = \left| \sum_i \frac{\vec{n}_i \times [(\vec{n}_i - \vec{\beta}_i) \times \dot{\vec{\beta}}_i]}{(1 - \vec{\beta}_i \cdot \vec{n}_i)^2} \right. \quad (4.14)$$

$$\left. \times \int_{t_i}^{t_{i+1}} e^{i\omega[t - \vec{n}_i \cdot (\vec{r}_i + \vec{\beta}_i(t-t_i) + \frac{\ddot{\vec{\beta}}_i}{2}(t-t_i)^2)]} dt \right|^2.$$

Die Werte für die $\ddot{\vec{\beta}}_i$ ergeben sich aus den Randbedingungen für die Interpolation

$$\ddot{\vec{\beta}}_i = \vec{\beta}_i - \frac{t_{i+1} - t_i}{2} \dot{\vec{\beta}}_i. \quad (4.15)$$

Um die Strahlung nach (4.14) berechnen zu können, wird eine Methode zur Berechnung des Integrals

$$\int_{t_i}^{t_{i+1}} e^{i\omega(a_i t^2 + b_i t + c_i)} dt \quad (4.16)$$

benötigt. In Gleichung (4.16) sind einige Konstanten zu a_i , b_i und c_i zusammengefasst worden. Die Werte dieser Konstanten erhält man durch Vergleich mit (4.14). Aufgrund der für große ω schnell oszillierenden Exponentialfunktion ergibt eine direkte numerische Integration von (4.16) keinen Sinn, da die benötigte Rechenzeit für eine genauere Berechnung der Trajektorie im Vorfeld besser investiert wäre. Es ist somit nötig, das Integral (4.16) in einen einfacher zu berechnenden Ausdruck umzuformen. Um dies zu erreichen, wird eine Fallunterscheidung anhand

der Konstanten a_i vorgenommen. Es erweist sich als zweckmäßig, für die numerische Berechnung a_i vollständig zu vernachlässigen, falls dessen Betrag einen Wert von 10^{-5} unterschreitet.

Fall I: $a_i < -10^{-5}$

Falls a_i negativ (und gleichzeitig nicht vernachlässigbar klein) ist, kann das Integral (4.16) umgeformt werden.

$$\begin{aligned} \int_{t_i}^{t_{i+1}} e^{i\omega(a_i t^2 + b_i t + c_i)} dt &= \frac{e^{i\omega\chi_i}}{\sqrt{-\omega a_i}} \int_{\tilde{\xi}_i}^{\tilde{\xi}_{i+1}} e^{-i\xi^2} d\xi \\ &= \frac{e^{i\omega\chi_i}}{\sqrt{-\omega a_i}} \left[C(\tilde{\xi}_{i+1}) - C(\tilde{\xi}_i) - i(S(\tilde{\xi}_{i+1}) - S(\tilde{\xi}_i)) \right] \end{aligned} \quad (4.17)$$

Hierbei werden die Substitutionen

$$\tilde{\xi}_i = \sqrt{\omega} \left(\sqrt{-a_i} t_i - \frac{b_i}{2\sqrt{-a_i}} \right), \quad (4.18)$$

$$\chi_i = c_i - \frac{b_i^2}{4a_i} \quad (4.19)$$

verwendet. Die Funktionen C und S in Gleichung (4.17) bezeichnen wieder die Fresnel-Integrale (4.24) und (4.25). Die Berechnung des Integrals (4.16) wird somit auf die Auswertung dieser Integrale zurückgeführt. Die numerische Berechnung der Fresnel-Integrale wird in Anhang B behandelt.

Fall II: $-10^{-5} < a_i < 10^{-5}$

Für den Fall, dass a_i im Integral (4.16) so klein ist, dass es gänzlich vernachlässigt werden kann, also $|a_i| \ll 1$, kann das Integral direkt ausgewertet werden.

$$\int_{t_i}^{t_{i+1}} e^{i\omega(b_i t + c_i)} dt = \frac{e^{i\omega c_i}}{i\omega b_i} (e^{i\omega b_i t_{i+1}} - e^{i\omega b_i t_i}) \quad (4.20)$$

Fall III: $a_i > 10^{-5}$

Falls a_i positiv (und gleichzeitig nicht vernachlässigbar klein) ist, kann das Integral (4.16) umgeformt werden.

$$\begin{aligned} \int_{t_i}^{t_{i+1}} e^{i\omega(a_i t^2 + b_i t + c_i)} dt &= \frac{e^{i\omega\chi_i}}{\sqrt{\omega a_i}} \int_{\xi_i}^{\xi_{i+1}} e^{i\xi^2} d\xi \\ &= \frac{e^{i\omega\chi_i}}{\sqrt{\omega a_i}} [C(\xi_{i+1}) - C(\xi_i) + i(S(\xi_{i+1}) - S(\xi_i))] \end{aligned} \quad (4.21)$$

Hierbei werden die Substitutionen (4.19) und

$$\xi_i = \sqrt{\omega} \left(\sqrt{a_i} t_i + \frac{b_i}{2\sqrt{a_i}} \right) \quad (4.22)$$

$$(4.23)$$

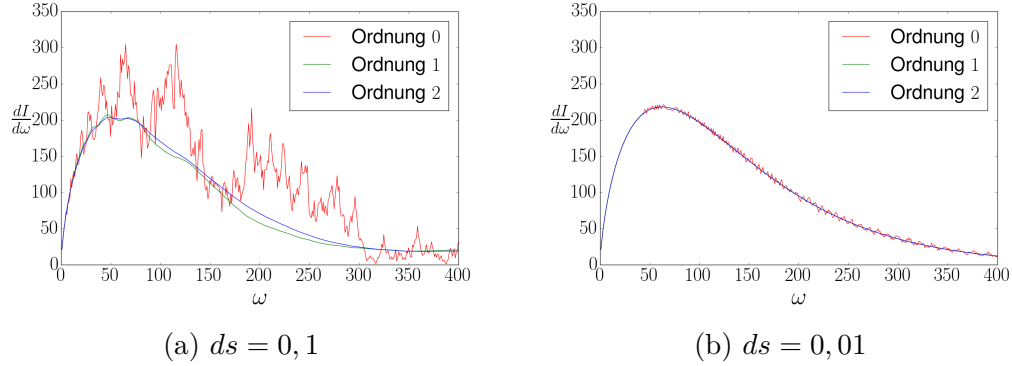


Abbildung 4.1: Vergleich verschiedener Interpolationsordnungen der Trajektorien zur Strahlungsberechnung. Die Frequenz ω ist in Einheiten von $4\pi\epsilon_0 m_e c^3 / e^2$ gegeben. $\frac{d^2 I}{d\omega d\Omega}$ ist die tangential emittierte Energie eines Teilchens pro Frequenzintervall $d\omega$ und pro Raumwinkelement $d\Omega$ in Einheiten von $\epsilon_0 e^2 / (\pi c)$.

verwendet. Die Funktionen C und S in Gleichung (4.21) bezeichnen die Fresnel-Integrale.

$$C(x) = \int_0^x \cos(t^2) dt \quad (4.24)$$

$$S(x) = \int_0^x \sin(t^2) dt \quad (4.25)$$

Es sei noch angemerkt, dass die Konstante a_i in allen drei Substitutionen (4.18), (4.19) und (4.22) im Nenner vorkommt, was eine exakte Berechnung für betragsmäßig sehr kleine a_i unmöglich macht, weshalb in diesem Fall auf die Näherung aus **Fall I** zurückgegriffen werden muss.

Um die drei beschriebenen Methoden zur Berechnung des Emissionsspektrums miteinander vergleichen zu können, berechnen wir das Spektrum einer Ladung, welche in einem homogenen B -Feld $B_z = 1$ gyriert. Für die Energie des geladenen Teilchens wählen wir $\gamma = 7$. Somit ergibt sich ein Gyrationradius von $r \approx 7$. Als Spektralverteilung der emittierten Strahlung wird das Synchrotronspektrum erwartet. Abbildung 4.1 zeigt die Ergebnisse der Spektralberechnung mit den drei oben vorgestellten Berechnungsmethoden. Für die Simulation wird eine Schrittweite von $ds = 0,01$ verwendet. Zur Berechnung der Spektralverteilung wurden einmal alle Datensätze aus der Simulation und zum Vergleich einmal nur jeden zehnten Zeitschritt (was somit einer Schrittweite von $ds = 0,1$ entspricht) verwendet, um die Güte der Interpolation beurteilen zu können. In Abbildung 4.1a kann man bei einer Schrittweite von $ds = 0,1$ bei der Interpolation erster und zweiter Ordnung

bereits deutlich das Synchrotronspektrum erkennen, während die Interpolation nullter Ordnung hier keine brauchbaren Daten liefert. Wie in Abbildung 4.1b zu sehen, ist bei einer Schrittweite von $ds = 0,01$ bei allen drei Interpolationsordnungen das Synchrotronspektrum erkennbar. Das Ergebnis der Interpolation erster und zweiter Ordnung ist in der Abbildung nicht mehr unterscheidbar. Die beiden Linien liegen exakt übereinander. Bei dem Spektrum aus der Interpolation nullter Ordnung sind ab einer Frequenz von $\omega \approx 50$ leichte Abweichungen gegenüber den anderen beiden Spektren zu erkennen. Insgesamt kann man zusammenfassen, dass (für diese Berechnung) sowohl die Methode der linearen Interpolation als auch die Methode der quadratischen Interpolation lediglich ein Zehntel der Ausgangsdaten im Vergleich zur direkten Summation benötigen, um ähnliche Ergebnisse zu liefern.

4.3 Photonenspektrum

Nachdem in Abschnitt 4.1 eine Formel für die klassische Frequenzverteilung vorgestellt worden ist, soll nun eine semiklassische Formel für die Verteilung der emittierten Photonen diskutiert werden. Da hochfrequente Strahlung, wie in Abschnitt 3.1.2 erläutert, nicht auf dem Gitter dargestellt werden kann, ist die Emission von Photonen nötig, um dennoch die gesamte Strahlungssignatur der Teilchen in die Simulation zu integrieren. Nach Nikishov und Ritus [19] ist die Frequenzverteilung der Photonen wie folgt gegeben

$$\frac{dI}{d\omega} = -\frac{e^2 m^2 \omega}{4\pi\epsilon_0 \sqrt{\pi}\epsilon^2} \left(\int_x^\infty \Phi(\xi) d\xi + \left(\frac{2}{x} + \frac{\hbar\omega}{\epsilon} \chi \sqrt{x} \right) \Phi'(x) \right), \quad (4.26)$$

wobei

$$x = \left(\frac{\hbar\omega}{\epsilon' \chi} \right)^{\frac{2}{3}} = \frac{m^2}{\epsilon^2} \left(\frac{\epsilon\omega}{\epsilon' \omega_0} \right)^{\frac{2}{3}}, \quad \chi = \frac{|\vec{B}|}{B_0} \frac{p}{m} \approx \frac{|\vec{B}|}{B_0} \gamma, \quad B_0 = \frac{m_e^2 c^2}{e\hbar}. \quad (4.27)$$

Die Größen ϵ und ϵ' sind die Gesamtenergie des emittierenden Teilchens vor und nach der Emission des Photons

$$\epsilon = \gamma m_e c^2, \quad \epsilon' = \gamma' m_e c^2 \quad (4.28)$$

und Φ ist die Airy-Funktion

$$\Phi(t) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty \cos\left(\frac{\xi^3}{3} + \xi t\right) d\xi. \quad (4.29)$$

Um die Strahlung durch Photonenemission in unsere Simulationen zu integrieren, führen wir das Photon als neues Teilchen in unsere Simulation ein. Für jeden Zeitschritt des emittierenden Teilchens erzeugen wir Photonen gemäß der Verteilung (4.26). Die Photonen werden jeweils tangential zur Bahnebene des strahlenden Teilchens emittiert. Die gerichtete Abstrahlung der Photonen tangential zur Bahnebene der Teilchen ist, wie in Abschnitt 4.5 gezeigt wird, gerechtfertigt.

4.4 Synchrotronstrahlung

Als Beispiel soll die Bewegung eines Elektrons in einem homogenen Magnetfeld simuliert werden. Das Spektrum der dabei emittierten Photonen wird anschließend mit dem klassischen Emissionsspektrum nach (4.10) verglichen. Für die Magnetfeldstärke in der Simulation wird $B_z = 10^{-6}$ und für die Energie des Elektrons $\gamma = 200$ gewählt. Das Elektron bewegt sich somit auf einer kreisförmigen Bahn mit einem Gyrationradius von $\rho = 2 \times 10^8$. Für die Berechnung des klassischen Emissionsspektrums (4.10) eines sich kreisförmig bewegenden Teilchens kann Gleichung (4.10) analytisch gelöst werden. Für die Synchrotronstrahlung ergibt sich

$$\frac{d^2 I}{d\omega d\Omega} = \frac{e^2}{12\pi^3 \epsilon_0 c} \left(\frac{\omega \rho}{c} \right)^2 \left(\frac{1}{\gamma^2} + \theta^2 \right)^2 \left[K_{2/3}^2(\xi) + \frac{\theta^2}{(1/\gamma^2) + \theta^2} K_{1/3}^2(\xi) \right]. \quad (4.30)$$

Der Parameter ξ ist hierbei wie folgt definiert

$$\xi = \frac{\omega \rho}{3c} \left(\frac{1}{\gamma^2} + \theta^2 \right)^{3/2}. \quad (4.31)$$

Mit θ wird der Winkel zwischen Bahnebene und Emissionsrichtung bezeichnet. $K_{2/3}$ und $K_{1/3}$ sind die modifizierten Bessel-Funktionen

$$K_{2/3}(\xi) = \sqrt{3} \int_0^\infty x \sin \left(\frac{3}{2} \xi \left(x + \frac{x^3}{3} \right) \right) dx, \quad (4.32)$$

$$K_{1/3}(\xi) = \sqrt{3} \int_0^\infty \cos \left(\frac{3}{2} \xi \left(x + \frac{x^3}{3} \right) \right) dx. \quad (4.33)$$

Integration über alle Raumwinkel Ω liefert das Frequenzspektrum der gesamten abgestrahlten Leistung, was direkt mit dem Photonenspektrum verglichen werden kann. Es gilt

$$\frac{dI}{d\omega} = \sqrt{3} \frac{e^2}{4\pi \epsilon_0 c} \gamma \frac{\omega}{\omega_c} \int_{\omega/\omega_c}^\infty K_{5/3}(x) dx. \quad (4.34)$$

Hierbei ist die kritische Frequenz ω_c wie folgt definiert

$$\omega_c = \frac{3}{2} \gamma^3 \left(\frac{c}{\rho} \right) = \frac{3}{2} \left(\frac{E}{mc^2} \right)^3 \frac{c}{\rho}. \quad (4.35)$$

In Abbildung 4.2 sind das klassische Emissionsspektrum und die Verteilung der in der Simulation erzeugten Photonen gegenübergestellt. Nun wird noch die ge-

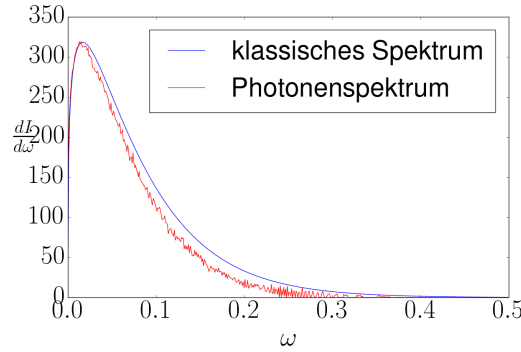


Abbildung 4.2: Synchrotronstrahlung. ω ist in Vielfachen von $\omega_0 = 4\pi\epsilon_0 m_e c^3 / e^2$ gegeben. I ist die emittierte Gesamtenergie pro Umlauf und pro Frequenzintervall in Einheiten von $m_e c^2 / \omega_0$ d.h. Integration über ω gibt die emittierte Strahlung pro Umlauf in Einheiten von $m_e c^2$

samte klassisch abgestrahlte Energie mit der Gesamtenergie der in der Simulation erzeugten Photonen verglichen. Die gesamte abgestrahlte klassische Energie kann mit der Larmor-Formel [16] berechnet werden.

$$E_{cl} = \frac{e^2 \gamma^4}{3\epsilon_0 \rho} = 33.51 m_e c^2 \quad (4.36)$$

Zum Vergleich wird noch die Gesamtenergie der abgestrahlten Photonen angegeben. Es gilt

$$E_{\text{Photon}} = 28.7416 m_e c^2. \quad (4.37)$$

Durch eine Quantenkorrektur [14] der klassischen Energiegleichung bekommt man einen Wert, der näher an der Energie der Photonen liegt.

$$E_{\text{corr}} = E_{cl} \left(1 - \frac{55\sqrt{3}}{16} \chi + 48\chi^2 \right) = 29.25 m_e c^2 \quad (4.38)$$

Die relative Abweichung zwischen der quantenkorrigierten klassischen Energie und der Photonenenergie beträgt somit weniger als 2%.

4.5 Strahlungsemission bei Streuprozessen

In diesem Abschnitt soll die bei Streuprozessen entstehende Strahlung untersucht werden. Es wird sich zeigen, welche Komponenten der Strahlung auf dem Gitter propagiert werden können, und welche Teile durch Photonen dargestellt werden müssen. Hierfür wird die Streuung zweier Elektronen bei drei unterschiedlichen Energien simuliert. Für die Beispiele wird eine Gitterkonstante von $dx = dy = dz = 0.05$ gewählt. Die Trajektorien der Streuteilchen und die bei der Streuung entstandenen Felder sind in Abbildung 4.3 gezeigt. Die kleinste Wellenlänge, die auf

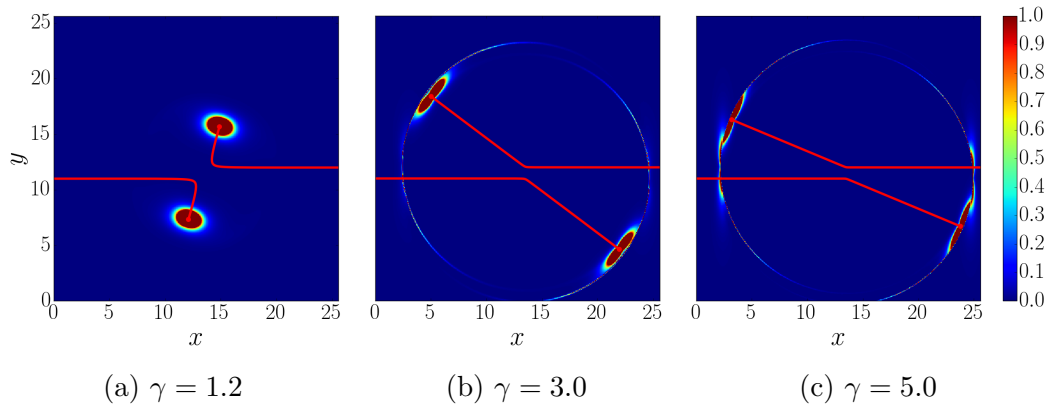


Abbildung 4.3: Felder der e^-e^- -Streuung bei verschiedenen Werten für γ . $|\vec{E}|^2$ ist zur Zeit $t = 18$ abgebildet. \vec{E} und $c\vec{B}$ in Einheiten $4\pi\epsilon_0 m_e^2 c^4 / e^3 = 1.77 \cdot 10^{20}$ V/m, Längen in Einheiten $e^2 / (4\pi\epsilon_0 m_e c^2) = 2.82 \cdot 10^{-15}$ m, Zeiten in Einheiten $e^2 / (4\pi\epsilon_0 m_e c^3) = 9.40 \cdot 10^{-24}$ s.

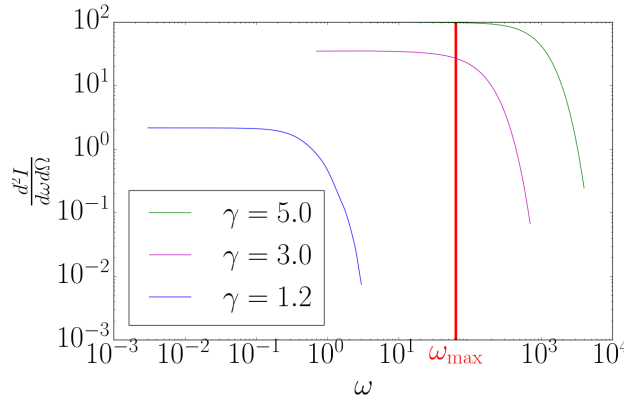
diesem Gitter noch aufgelöst werden kann, ist durch die Nyquist-Grenze gegeben. Diese lautet

$$\lambda_{\min} = 2 \cdot dx = 0.1. \quad (4.39)$$

Dies entspricht einer Frequenz von

$$\omega_{\max} = \frac{2\pi}{\lambda_{\min}} = 20\pi \approx 63. \quad (4.40)$$

Als Elektronenenergien für die drei Streubeispiele wird $\gamma = 1.2$, $\gamma = 3.0$ und $\gamma = 5.0$ gewählt. Die Spektren der hierbei entstehenden Strahlung werden nach Gleichung (4.10) berechnet und sind in Abbildung 4.4 gezeigt. Wie man sofort erkennen kann, kann lediglich die Strahlung der niederenergetischen Streuung bei



Abbildungung 4.4: Spektren der in der Bahnebene emittierten Strahlung der e^-e^- -Streuung. Die Frequenz ω ist in Einheiten von $\omega_0 = 4\pi\epsilon_0 m_e c^3 e^2$ gegeben. $\frac{d^2 I}{d\omega d\Omega}$ ist die in Vorwärtsrichtung emittierte Energie eines Teilchens pro Frequenzintervall $d\omega$ und pro Raumwinkelement $d\Omega$ in Einheiten von $\frac{e^2}{16\pi^3 \epsilon_0 c}$.

$\gamma = 1.2$ vollständig auf dem Gitter abgebildet werden. Für die Streuung bei höheren Energien liegt nur ein kleiner Teil der Strahlung unterhalb der kritischen Frequenz ω_{\max} , so dass dieser auf dem Gitter abgebildet werden kann. Der Großteil der Strahlung mit Frequenzen $\omega > \omega_{\max}$ geht auf dem Gitter verloren, da dieser nicht mehr aufgelöst werden kann. Dieser Teil der Strahlung kann in der Simulation nur durch Photonen dargestellt werden. Wie in Abschnitt 4.3 beschrieben, werden die Photonen in der Simulation jedoch in eine bestimmte Richtung (tangential zur Bahnkurve) emittiert. Um zu sehen, inwieweit das mit der klassischen Strahlung konsistent ist, wird die Richtungsabhängigkeit der emittierten klassischen Strahlung betrachtet. In Abbildung 4.5 ist die Leistung der abgestrahlten Strahlung gegen den Winkel θ bezüglich der Bahnebene der Teilchen gezeigt. Man sieht, dass die Strahlung für kleine Energien relativ gleichmäßig in einen großen Winkelbereich emittiert wird. Bei großen Energien hingegen wird der Großteil der Strahlung in einen sehr schmalen Winkelbereich abgestrahlt. Dennoch wird auch bei großen Energien Strahlung unter allen Winkeln emittiert, was auf den Bildern jedoch kaum zu erkennen ist. Es ist zweckmäßig, die Strahlung aufzuteilen in einen Teil, der alle Frequenzen kleiner der Grenzfrequenz ω_{\max} enthält, und auf dem Gitter dargestellt werden kann, und einen Teil, der alle höheren Frequenzen enthält und über Photonen dargestellt werden muss. In den Abbildungen 4.6a und 4.6b ist nochmals die Richtungsabhängigkeit der emittierten Strahlungsleistung für die Streuenergien $\gamma = 3.0$ und $\gamma = 5.0$ gezeigt, getrennt in die Anteile $\omega \leq \omega_{\max}$ und

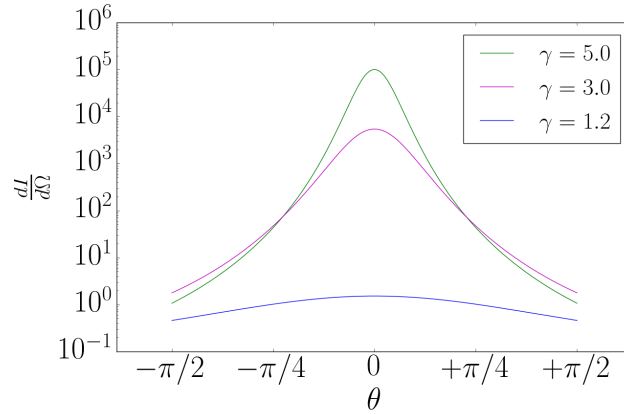


Abbildung 4.5: Winkelverteilung der emittierten Strahlung bei verschiedenen Energien γ . Der Winkel θ ist gegen die Bahnebene gemessen. $\frac{dI}{d\Omega}$ ist die abgestrahlte Energie pro Raumwinkelement in Einheiten von $\frac{m_e c^2}{4\pi^2}$.

$\omega > \omega_{\max}$. Man kann erkennen, dass die hohen Frequenzen fast ausschließlich unter

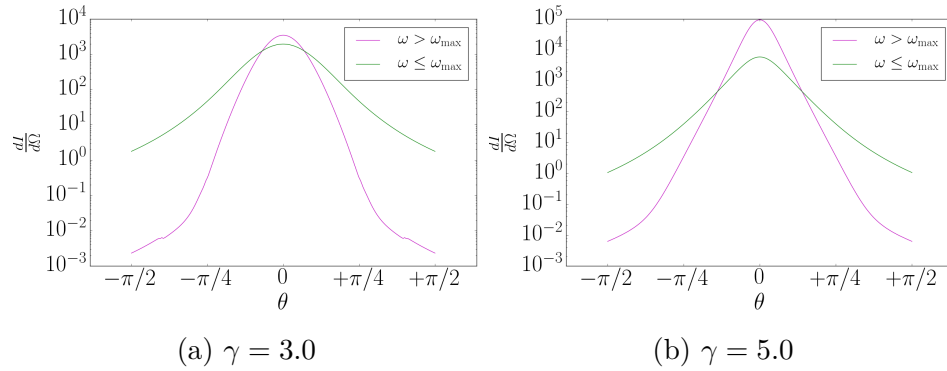


Abbildung 4.6: Winkelverteilung der unter dem Winkel θ gegen die Bahnebene emittierten Strahlung, aufgeteilt in Komponenten $\omega \leq \omega_{\max}$ und $\omega > \omega_{\max}$. $\frac{dI}{d\Omega}$ ist die abgestrahlte Energie pro Raumwinkelement in Einheiten von $\frac{m_e c^2}{4\pi^2}$.

einem sehr kleinen Winkel gegen die Bahnebene emittiert werden. Die Darstellung dieses Strahlungsanteils durch Photonen, welche tangential zur Bahnebene emittiert werden, ist somit konsistent mit der klassischen Strahlung.

Teil III

Zusammenfassung und Ausblick

Zusammenfassung und Ausblick

Es ist ein Konzept zur numerischen Lösung des Vlasov-Maxwell-Systems vorgestellt worden. Zentraler Punkt hierbei ist die Aufteilung des Raumes in Nah- und Fernfeldbereiche. Um die Felder zu erhalten, welche auf die Teilchen wirken, werden diese in den Nahfeldbereichen durch die Liénard-Wiechert-Potentiale berechnet, während in den Fernfeldbereichen die Maxwell-Gleichungen mit einem FDTD-Verfahren gelöst werden. Durch diese Aufteilung wird eine lineare Skalierung der Laufzeit mit der Teilchenzahl N erreicht. Das vorgestellte numerische Konzept ist außerdem parallelisierbar, so dass die Simulationen auf einem verteilten Großrechner durchführbar sind. Somit steht für die Simulation von Nanoplasmen eine Alternative zur PIC-Methode zur Verfügung und bietet gegenüber dieser einige Verbesserungen. Dies sind die korrekte Behandlung der Strahlungsdämpfung, die genaue Berechnung der Felder bei kleinen Abständen, die Möglichkeit der korrekten Berechnung simultaner Vielfachstöße mit Strahlung und die weitgehende Vermeidung numerischen Rauschens. Die in der vorliegenden Arbeit vorgestellte Methode kann zudem völlig gitterfrei oder völlig gitterbasiert arbeiten.

Das in dieser Arbeit entwickelte Konzept ist jedoch nicht auf die Lösung des Vlasov-Maxwell-Systems beschränkt, sondern kann in Zukunft auf viele weitere langreichweitig wechselwirkende Vielteilchensysteme angewandt werden. Für alle Vielteilchensysteme, bei denen die Wechselwirkung durch Felder beschrieben wird, können Nah- und Fernfeldbereiche definiert werden, wobei die Wechselwirkungen in den Nahfeldbereichen direkt berechnet und in den Fernfeldbereichen durch die Felder auf einem numerischen Gitter vermittelt werden. An den Grenzflächen zwischen Nah- und Fernfeldbereich werden die Randwerte gesetzt und die Felder propagieren mittels eines geeigneten Feldpushers auf einem numerischen Gitter entsprechend ihrer Feldgleichung.

Teil IV

Anhang

Im Anhang dieser Arbeit sollen einige Konzepte vorgestellt werden, welche sich thematisch nicht eindeutig einem der bisherigen Kapitel zuordnen lassen. In Anhang A wird ein Filtermechanismus vorgestellt, um bestimmte Frequenzen aus den Feldern filtern zu können. In Anhang B wird die numerische Berechnung der Fresnel Integrale beschrieben, welche im Abschnitt 4.2 verwendet worden sind. In Anhang C werden die Ableitungen der Liénard-Wiechert-Felder $\partial_\xi F^{\mu\nu}$, wie sie für die Landau-Lifschitz-Dämpfung (2.3) benötigt werden, berechnet. In Anhang D wird die verwendete Normierung der physikalischen Einheiten erläutert.

Anhang A

Numerische Filter

In diesem Kapitel werden einige Filtermechanismen vorgestellt, welche es erlauben bestimmte Frequenzen aus dem Feld herauszufiltern oder allgemein bestimmte Frequenzen gezielt zu manipulieren. Zunächst soll jedoch untersucht werden, bis zu welchen Frequenzen sich Felder überhaupt auf einem Gitter darstellen lassen. Anschließend wird die diskrete Fourier-Transformation eingeführt, um hiermit gezielt bestimmte Frequenzanteile der Felder manipulieren zu können.

A.1 Nyquist-Frequenz

In Abschnitt 3.1.2 wurde gezeigt, dass Wellenpakete, deren zentrale Wellenlänge der kritischen Wellenlänge λ_c entspricht, nicht mehr sinnvoll auf dem Gitter propagieren. Allgemein lassen sich Wellen nur bis zu einer kritischen Frequenz f_c auf einem Gitter darstellen.

$$f_c = \frac{1}{2\Delta} \quad (\text{A.1})$$

Diese kritische Frequenz f_c wird Nyquist-Frequenz genannt. Dies kann man sich am Beispiel einer ebenen Welle, welche in x -Richtung läuft, klar machen. Es soll angenommen werden, dass die Welle linear in y -Richtung polarisiert ist. Zum Speichern der Daten wird ein eindimensionales Gitter in x -Richtung benötigt. Angenommen an einem Gitterpunkt befinde sich ein Maximum von E_y der ebenen Wellen. Bei einer Wellenlänge von λ_c befinde sich am nächsten Gitterpunkt dann das darauf folgende Minimum von E_y . Kleinere Wellenlängen können auf dem Gitter nicht mehr aufgelöst werden. Dies ist in Abbildung A.1 verdeutlicht. Die beiden Wellen in dieser Abbildung liefern die gleichen Werte an den Gitterpunkten. Anhand der Daten an den Gitterstellen können diese beiden Wellen somit nicht unterschieden werden. Dieser Effekt wird als Aliasing bezeichnet.

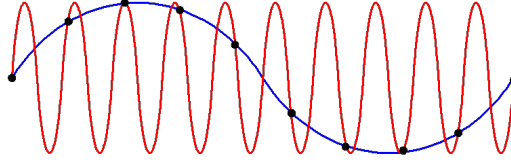


Abbildung A.1: Veranschaulichung des Aliasing-Effekts

Ist hingegen eine beliebige Welle auf dem Gitter gegeben und es sei bekannt, dass diese nur Fourierkomponenten mit Frequenzen $f \leq f_c$ enthält, so kann die gesamte Welle anhand der Werte an den Gitterstellen rekonstruiert werden. Es soll ein eindimensionales Beispiel betrachtet werden. Angenommen E_y habe einen beliebigen Verlauf entlang der x -Richtung. Die Werte von E_y seien an den diskreten Stellen $j\Delta x$ gespeichert. Unter der Annahme, dass E_y keine Fourierkomponenten mit Frequenzen $f > f_c$ enthält, kann der gesamte räumliche Verlauf von E_y rekonstruiert werden. Er lautet

$$E_y(x) = \Delta x \sum_{j=-\infty}^{\infty} E_y(j\Delta x) \frac{\sin(2\pi f_c(x - j\Delta x))}{\pi(x - j\Delta x)}. \quad (\text{A.2})$$

A.2 Diskrete Fourier-Transformation

Es soll ganz allgemein ein Feld $F(x, y, z)$ betrachtet werden. Die Feldwerte liegen diskret auf einem numerischen Gitter vor $F_{(j,k,l)} = F(j \cdot \Delta x, k \cdot \Delta y, l \cdot \Delta z)$. Die diskrete Fourier-Transformation $\tilde{F}_{(j',k',l')}$ des Feldes $F_{(j,k,l)}$ ist durch

$$\tilde{F}_{(j',k',l')} = \sum_{j=0}^{N_x-1} \sum_{k=0}^{N_y-1} \sum_{l=0}^{N_z-1} F_{(j,k,l)} e^{2\pi i \left(j \frac{j'}{N_x} + k \frac{k'}{N_y} + l \frac{l'}{N_z} \right)} \quad (\text{A.3})$$

definiert. Hierbei sind N_x , N_y und N_z die Anzahl der Gitterpunkte in x -, y - und z - Richtung. Die Fouriertransformierte ist periodisch.

$$\tilde{F}_{(-j',-k',-l')} = \tilde{F}_{(N_x-j', N_y-k', N_z-l')} \quad (\text{A.4})$$

Es gibt genauso viele unabhängige Werte der Fouriertransformierten $\tilde{F}_{(j',k',l')}$, wie für das Feld $F_{(j,k,l)}$ selbst. Üblicherweise werden die Indizes j' , k' und l' auf den Bereich $-\frac{N}{2} \dots \frac{N}{2}$ beschränkt. Der Wert $\tilde{F}_{(j',k',l')}$ gibt die Amplitude (und Phase) der Feldkomponente mit dem Wellenvektor $K = (j', k', l')^T$ (geeignet normiert) im Feld $F_{(j,k,l)}$ an. Aus der Fourier-Transformierten $\tilde{F}_{(j',k',l')}$ kann das ursprüngliche

Feld $F_{(j,k,l)}$ rekonstruiert werden. Dies geschieht durch

$$F_{(j,k,l)} = \frac{1}{N_x N_y N_z} \sum_{j'=0}^{N_x-1} \sum_{k'=0}^{N_y-1} \sum_{l'=0}^{N_z-1} \tilde{F}_{(j',k',l')} e^{-2\pi i \left(j \frac{j'}{N_x} + k \frac{k'}{N_y} + l \frac{l'}{N_z} \right)}. \quad (\text{A.5})$$

Somit ist es möglich, durch Manipulation von $\tilde{F}_{(j',k',l')}$ gezielt Feldanteile mit einem bestimmten Wellenvektor und somit auch bestimmte Frequenzanteile in dem Feld $F_{(j,k,l)}$ zu manipulieren. Zum Beispiel können bestimmte Frequenzen herausgefiltert oder verstärkt werden.

A.3 Beispiel mit zwei ebenen Wellen

Nun soll der Filtermechanismus mit Hilfe der diskreten Fourier-Transformation an einem einfachen Beispiel demonstriert werden. Hierfür werden zwei ebene Wellen mit den Wellenvektoren

$$k_1 = \begin{pmatrix} 1, 25 \\ 2, 5 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad k_2 = \begin{pmatrix} 1, 25 \\ 0, 6 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (\text{A.6})$$

überlagert. Die Superposition dieser beiden Wellen ist in Abbildung A.2 gezeigt. Anschließend wird eine diskrete Fourier-Transformation durchgeführt, um das Feld

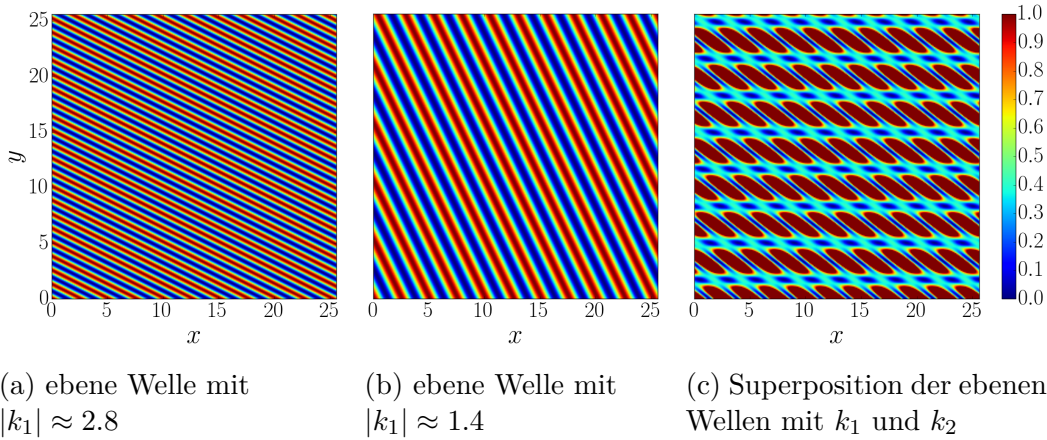


Abbildung A.2: Zeigt die Superposition zweier ebener Wellen, welche als Test-case für den Filter dienen

wieder in seine Anteile $|k| < 2$ und $|k| > 2$ separieren zu können. Diese beiden

Anteile werden anschließend einzeln zurücktransformiert um die beiden ursprünglichen Wellen wieder herzustellen. Das Ergebnis dieser Separation ist in Abbildung A.3 gezeigt.

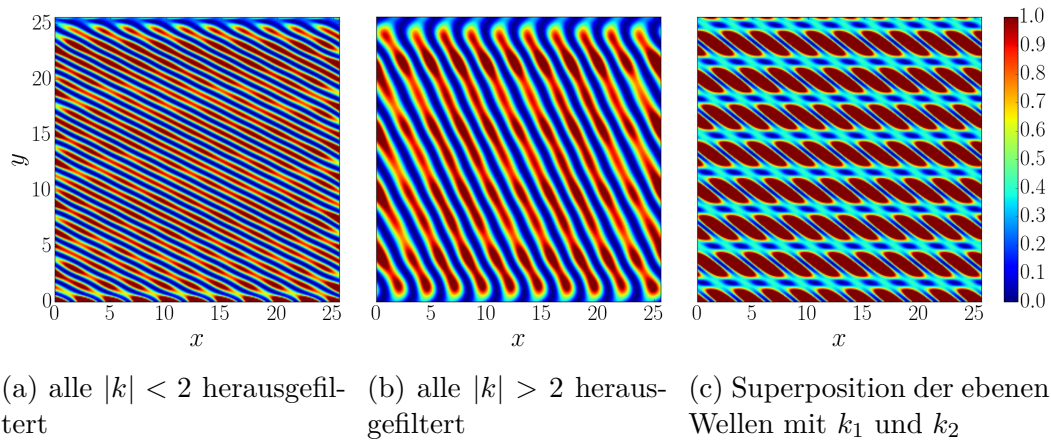


Abbildung A.3: Zeigt die Filterung bestimmter Wellenlängen mit Hilfe der diskreten Fourier-Transformation

Anhang B

Berechnung der Fresnel-Integrale $C(x)$ und $S(x)$

In diesem Anhang wird beschrieben, wie die Fresnel-Integrale $C(x)$ und $S(x)$ berechnet werden können [1]. Diese Integrale werden für die Berechnung in Abschnitt 4.2 benötigt. Sie lauten

$$C(x) = \int_0^x \cos(t^2) dt \quad \text{und} \quad S(x) = \int_0^x \sin(t^2) dt. \quad (\text{B.1})$$

Für die Berechnung dieser Integrale wird anhand der Größe des Argumentes eine Fallunterscheidung vorgenommen. Für kleine Argumente wird eine Taylor-Entwicklung verwendet, für mittelgroße Argumente eine Entwicklung nach sphärischen Bessel-Funktionen und für große Argumente wird eine asymptotische Darstellung verwendet. Der Programmcode lautet

```
double C(double x) {
    if(x<0) return -C(-x);
    if(x<0.5) return C_taylor(x);
    if(x<7) return C_intermediate(x);
    return C_asymptotic(x);
}

double S(double x) {
    if(x<0) return -S(-x);
    if(x<0.5) return S_taylor(x);
    if(x<7) return S_intermediate(x);
    return S_asymptotic(x);
} .
```

Die Gleichungen (B.1) können als Taylorreihe dargestellt werden. Sie lauten

$$C(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n)!} \frac{1}{4n+1} x^{4n+1}, \quad (\text{B.2})$$

$$S(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n+1)!} \frac{1}{4n+3} x^{4n+3}. \quad (\text{B.3})$$

Für kleine Argumente x erhält man bereits eine sehr gute Näherung, wenn die Summe nach einigen Summanden abgebrochen wird. Der Code zur Berechnung dieser Näherung lautet

```
double C_taylor(double x) {
    int num_iter = 100;
    double result, factor;

    result = num_iter%2 ? -1 : 1;
    for(int n = 2; n<=2*num_iter; n++) {
        result /= n;
    }
    result /= 4*num_iter+1;

    for(int i = num_iter-1; i>=0; i--) {
        factor = i%2 ? -1 : 1;

        for(int n = 2; n<=2*i; n++) {
            factor /= n;
        }
        factor /= (4*i+1);
        result = factor + x*x*x*x*result;
    }
    return x*result;
} .
```

Die Funktionen $C(x)$ und $S(x)$ können auch nach sphärischen Bessel-Funktionen j_n entwickelt werden. Die Entwicklung lautet

$$C(x) = x \cdot [j_0(x^2) + j_2(x^2) + j_4(x^2) + \dots], \quad (\text{B.4})$$

$$S(x) = x \cdot [j_1(x^2) + j_3(x^2) + j_5(x^2) + \dots]. \quad (\text{B.5})$$

Das Problem der Berechnung von $C(x)$ und $S(x)$ wird hierdurch auf die Berechnung der j_n zurückgeführt. Die Werte j_n sind durch eine Drei-Term-Rekursion

$$j_{n+1}(x) = \frac{2n+1}{x} j_n(x) - j_{n-1}(x) \quad (\text{B.6})$$

und durch die Startwerte

$$j_0 = \frac{\sin(x)}{x}, \quad j_1 = \frac{\sin(x)}{x^2} - \frac{\cos(x)}{x} \quad (\text{B.7})$$

bestimmt. Da die Funktionen j_n die Minimallösung der Drei-Term-Rekursion (B.6) sind, ist diese Rekursion in Vorwärtsrichtung numerisch nicht stabil und die Werte können nicht einfach rekursiv nach (B.6) berechnet werden. Diese Instabilität ist in der Literatur als *Besselscher Irrgarten* bekannt. Jedoch ist die Rekursion in Rückwärtsrichtung stabil für die Bessel-Funktionen

$$j_{n-1}(x) = \frac{2n+1}{x} j_n(x) - j_{n+1}. \quad (\text{B.8})$$

Um somit die Summe in (B.4) und (B.5) bis zum Summanden j_N zu berechnen, kann ausgehend von den Werten j_N und j_{N-1} die Rekursion in Rückwärtsrichtung (B.8) angewandt werden. Es bleibt die Berechnung der Werte j_N und j_{N-1} für gegebenes N . Hierfür wird auf die sphärischen Neumann-Funktionen y_n zurückgegriffen. Diese genügen derselben Rekursionsvorschrift wie die Bessel-Funktionen mit dem Unterschied, dass diese für die Neumann-Funktionen in Vorwärtsrichtung numerisch stabil ist. Die Werte von y_n lassen sich aus den Startwerten y_0 und y_1 direkt rekursiv durch

$$y_{n+1}(x) = \frac{2n+1}{x} y_n(x) - y_{n-1}, \quad (\text{B.9})$$

$$y_0 = -\frac{\cos(x)}{x}, \quad (\text{B.10})$$

$$y_1 = -\frac{\cos(x)}{x^2} - \frac{\sin(x)}{x} \quad (\text{B.11})$$

berechnen. Aus den Werten von y_N und y_{N-1} lassen sich anschließend die Werte für j_N und j_{N-1} durch

$$j_{N-1}(x) = \frac{1}{x^2 (H(x)y_{N-1}(x) - y_N(x))}, \quad (\text{B.12})$$

$$j_N(x) = H(x)j_{N-1}(x) \quad (\text{B.13})$$

berechnen. Hierbei bezeichnet $H(x)$ den Quotienten aus $j_N(x)$ und $j_{N-1}(x)$. Dieser kann bereits im Vorfeld ohne Kenntnis von j_N und j_{N-1} als Kettenbruch berechnet werden. Es gilt

$$\begin{aligned} H(x) &= \frac{j_N(x)}{j_{N-1}(x)} \\ &= \frac{1}{2\left(N + \frac{1}{2}\right)x^{-1} -} \frac{1}{2\left(N + \frac{3}{2}\right)x^{-1} -} \frac{1}{2\left(N + \frac{5}{2}\right)x^{-1} -} \cdots \end{aligned} \quad (\text{B.14})$$

Der Programmcode zur Berechnung von $C(x)$ lautet

```

double C_intermediate(double x) {
    double j1, j2, j3, result, H, y1, y2, y3;
    int n_max = 1;
    double maxx = 1000000;

    y1 = -(cos(x*x)/x)/x;
    y2 = -(sin(x*x)/x)/x - (((cos(x*x)/x)/x)/x)/x;

    while (abs(y2)<x*x*maxx/(2*n_max+1)) {
        y3 = ((2*n_max+1)*y2/x)/x - y1;
        y1 = y2;
        y2 = y3;
        n_max++;
    }

    H = getH(n_max, x*x);

    result = 0;
    j2 = 1.0/(x*x*x*x*(H*y1-y2));
    j3 = H*j2;

    if(n_max%2 == 0) result = j3;
    else result = j2;

    for(int n = n_max-1; n>0; n--) {
        j1 = ((2*n+1)*j2/x)/x - j3;

        if(n%2 == 1) result += j1;

        // durchrotieren
        j3 = j2;
        j2 = j1;
    }
    return x*result;
}

```

Die Gleichungen (B.1) haben für große x -Werte die asymptotische Darstellung

$$C(x) = \sqrt{\frac{\pi}{8}} - \frac{B(x) \cos(x^2) - A(x) \sin(x^2)}{2x}, \quad (\text{B.15})$$

$$S(x) = \sqrt{\frac{\pi}{8}} - \frac{A(x) \cos(x^2) + B(x) \sin(x^2)}{2x}. \quad (\text{B.16})$$

Die Größen $A(x)$ und $B(x)$ werden asymptotisch durch die Reihen

$$A(x) = \sum_{k=0}^N \frac{(-1)^k \alpha_{2k}}{(2x^2)^{2k}} + \mathcal{O}\left(|x|^{-4N-4}\right), \quad (\text{B.17})$$

$$B(x) = \sum_{k=0}^N \frac{(-1)^k \alpha_{2k+1}}{(2x^2)^{2k+1}} + \mathcal{O}\left(|x|^{-4N-6}\right) \quad (\text{B.18})$$

mit

$$\alpha_k = 1 \cdot 3 \cdot \dots \cdot (2k-1) \quad \text{und} \quad \alpha_0 = 1 \quad (\text{B.19})$$

dargestellt. Für große Argumente x erhält man hieraus eine sehr gute Näherung. Der Code zur Berechnung lautet

```
double C_asymptotic(double x) {
    double pi = 3.14159265359;
    return sqrt(pi/8.0) - (B(x)*cos(x*x)-A(x)*sin(x*x))
        /(2*x);
}

double A(double x) {
    int num_iter = 30;
    double result, factor;

    result = pow(-1, num_iter)*(4*num_iter-1)*(4*
        num_iter-3);

    for(int k = num_iter-1; k>=0; k--) {
        factor = pow(-1, k);
        if(k != 0) result = (factor + result/(4.0*x
            *x*x*x))*(4*k-1)*(4*k-3);
        else result = factor + result/(4.0*x*x*x*x)
            ;
    }
    return result;
} .
```


Anhang C

Berechnung der Landau-Lifschitz-Dämpfung in Liénard-Wiechert-Feldern

Um die Landau-Lifschitz-Dämpfung (2.3) eines Teilchens zu berechnen, müssen die Felder $F^{\mu\nu}$ sowie deren Ableitungen $\partial_\xi^\alpha F^{\mu\nu}$ am Ort des Teilchens bekannt sein. Die Felder $F^{\mu\nu}$, die auf ein Teilchen wirken, setzen sich aus den Feldern der anderen Teilchen sowie externen Feldern zusammen. Sind die externen Felder durch einen analytischen Ausdruck gegeben, so ist auch ein analytischer Ausdruck für deren Ableitung bekannt, welcher für die Berechnung der Dämpfung g^μ direkt verwendet werden kann. Die Ableitungen der Fernfelder auf dem Gitter wird, wie im Maxwell-Pusher auch, numerisch durch finite Differenzen berechnet. Für die Ableitung der Liénard-Wiechert-Felder kann ein analytischer Ausdruck verwendet werden. Diesen erhält man durch Ableitung von Gleichung (2.5) und (2.6). In diesem Anhang soll diese Ableitung explizit angegeben werden. Zum besseren Verständnis wird die Liénard-Wiechert-Formel zur Berechnung der Felder \vec{E} und \vec{B} hier nochmals angegeben. Sie lautet

$$\vec{E}(\vec{x}, t) = \left[\frac{\vec{n} - \vec{\beta}}{\gamma^2 (1 - \vec{\beta} \cdot \vec{n})^3 |\vec{R}|^2} \right]_{\text{ret}} + \left[\frac{\vec{n} \times [(\vec{n} - \vec{\beta}) \times \dot{\vec{\beta}}]}{(1 - \vec{\beta} \cdot \vec{n})^3 |\vec{R}|} \right]_{\text{ret}}, \quad (\text{C.1})$$

$$\vec{B}(\vec{x}, t) = [\vec{n} \times \vec{E}]_{\text{ret}}. \quad (\text{C.2})$$

Hierbei ist $\vec{R} = \vec{x} - \vec{x}_p$, $n = (\vec{x} - \vec{x}_p)/|\vec{R}|$, $\beta = \dot{\vec{x}}_p$ (normiert auf c) und \vec{x}_p ist die Position des Teilchens, welche die Felder erzeugt. \vec{R} wird hier im Gegensatz zu Gleichung (2.5) und (2.6) als Vektor definiert. Die Ausdrücke in den Klammern

sind jeweils zur retardierten Zeit auszuwerten. Es wird nun schrittweise die Ableitung dieser Formel nach x^μ angegeben. Hierbei werden die beiden Terme getrennt betrachtet. Der erste Term, welcher wie $1/|\vec{R}|^2$ abfällt, wird als statischer Term, der zweite, welcher wie $1/|\vec{R}|$ abfällt, als Strahlungsterm bezeichnet. Die Ableitung nach dem Ort \vec{x} und nach der Zeit t wird ebenfalls getrennt betrachtet.

Wie in Abschnitt 1.4.2 erklärt, muss die Liénard-Wiechert-Formel zur retardierten Zeit t_{ret} ausgewertet werden. Die retardierte Zeit erhält man aus dem Schnittpunkt des Rückwärtslichtkegels des Beobachtungspunktes mit der Teilchentrajektorie im Minkowskiraum. Um die Ableitung von der Liénard-Wiechert-Formel zu berechnen, wird als erster Schritt die Ableitung dieses Schnittpunktes nach dem Beobachtungsort \vec{x} und der Beobachtungszeit t berechnet. Den Schnittpunkt wird mit \vec{x}_s und t_s bezeichnet. Man erhält

$$\frac{dt_s}{dt} = \frac{(t - t_s)}{(\vec{x} - \vec{x}_s) \cdot \vec{\beta} + (t - t_s)} =: \Phi, \quad (\text{C.3})$$

$$\frac{d\vec{x}_s}{dt} = \frac{d\vec{x}_s}{dt_s} \frac{dt_s}{dt} = \vec{\beta} \frac{(t - t_s)}{(\vec{x} - \vec{x}_s) \cdot \vec{\beta} + (t - t_s)} = \Phi \vec{\beta}, \quad (\text{C.4})$$

$$\frac{dt_s}{dx_i} = \frac{(x_{si} - x_i)}{(\vec{x}_s - \vec{x}) \cdot \vec{\beta} + (t - t_s)} =: \Omega_i, \quad (\text{C.5})$$

$$\frac{dx_{si}}{dx_j} = \frac{dx_{si}}{dt_s} \frac{dt_s}{dx_j} = \beta_i \frac{(x_j - x_{sj})}{(\vec{x} - \vec{x}_s) \cdot \vec{\beta} - (t - t_s)} = \beta_i \Omega_j. \quad (\text{C.6})$$

Mit Hilfe der Ableitungen des Lichtkegelschnittpunktes \vec{x}_s und t_s können die Ableitungen der Größen \vec{R} , γ , \vec{n} , $\vec{\beta}$, usw. berechnet werden. Die Ableitungen nach der Zeit t lauten

$$\frac{dn_i}{dt} = \frac{\Phi}{|\vec{R}|} (n_i \vec{n} \cdot \vec{\beta} - \beta_i), \quad (\text{C.7})$$

$$\frac{d\gamma^2}{dt} = \sum_i \frac{2\beta_i}{(1 - |\vec{\beta}|^2)^2} \dot{\beta}_i \Phi, \quad (\text{C.8})$$

$$\frac{dR_i}{dt} = -\Phi \beta_i, \quad (\text{C.9})$$

$$\frac{d|\vec{R}|^2}{dt} = -2\Phi \sum_i R_i \beta_i, \quad (\text{C.10})$$

$$\frac{d\beta_i}{dt} = \Phi \dot{\beta}_i, \quad (\text{C.11})$$

$$\frac{d|\vec{R}|}{dt} = -\Phi \vec{n} \cdot \vec{\beta}, \quad (\text{C.12})$$

$$\frac{d\dot{\beta}_i}{dt} = \Phi \ddot{\beta}_i, \quad (\text{C.13})$$

$$\frac{d\vec{n} \cdot \vec{\beta}}{dt} = \Phi \left(\frac{1}{|\vec{R}|} \left((\vec{n} \cdot \vec{\beta})^2 - |\vec{\beta}|^2 \right) + \vec{n} \cdot \dot{\vec{\beta}} \right). \quad (\text{C.14})$$

Die Ableitungen nach dem Ort \vec{x} lauten

$$\frac{dn_i}{dx_j} = \frac{1}{|\vec{R}|} \left((\delta_{ij} - \beta_i \Omega_j) - n_i (n_j - \vec{n} \cdot \vec{\beta} \Omega_j) \right), \quad (\text{C.15})$$

$$\frac{d\gamma^2}{dx_j} = \sum_i \frac{2\beta_i}{(1 - |\vec{\beta}|^2)^2} \dot{\beta}_i \Omega_j, \quad (\text{C.16})$$

$$\frac{dR_i}{dx_j} = \delta_{ij} - \Omega_j \beta_i, \quad (\text{C.17})$$

$$\frac{d|\vec{R}|^2}{dx_j} = 2 \sum_i R_i (\delta_{ij} - \beta_i \Omega_j), \quad (\text{C.18})$$

$$\frac{d\beta_i}{dx_j} = \Omega_j \dot{\beta}_i, \quad (\text{C.19})$$

$$\frac{d|\vec{R}|}{dx_j} = n_j - \Omega_j \vec{n} \cdot \vec{\beta}, \quad (\text{C.20})$$

$$\frac{d\dot{\beta}_i}{dx_j} = \Omega_j \ddot{\beta}_i, \quad (C.21)$$

$$\frac{d\vec{n} \cdot \vec{\beta}}{dx_j} = \Omega_j \dot{\vec{\beta}} \cdot \vec{n} + \frac{1}{|\vec{R}|} \left((\beta_j - |\vec{\beta}|^2 \Omega_j) - \vec{n} \cdot \vec{\beta} (n_j - \vec{n} \cdot \vec{\beta} \Omega_j) \right). \quad (C.22)$$

Nun können die Ableitungen der beiden Terme aus Gleichung (C.1) berechnet werden. Die Ableitung des statischen Terms nach dem Ort \vec{x} lautet

$$\frac{d}{dx_j} \left[\frac{(n - \beta)_k}{\gamma^2 (1 - \vec{\beta} \cdot \vec{n})^3 |\vec{R}|^2} \right] = \quad (C.23)$$

$$\begin{aligned} & \sum_i \frac{d}{d(n - \beta)_i} \left[\frac{(n - \beta)_k}{\gamma^2 (1 - \vec{\beta} \cdot \vec{n})^3 |\vec{R}|^2} \right] \frac{d(n - \beta)_i}{dx_j} \\ & + \frac{d}{d\gamma^2} \left[\frac{(n - \beta)_k}{\gamma^2 (1 - \vec{\beta} \cdot \vec{n})^3 |\vec{R}|^2} \right] \frac{d\gamma^2}{dx_j} \\ & + \frac{d}{d|\vec{R}|^2} \left[\frac{(n - \beta)_k}{\gamma^2 (1 - \vec{\beta} \cdot \vec{n})^3 |\vec{R}|^2} \right] \frac{d|\vec{R}|^2}{dx_j} \\ & + \frac{d}{d\vec{\beta} \cdot \vec{n}} \left[\frac{(n - \beta)_k}{\gamma^2 (1 - \vec{\beta} \cdot \vec{n})^3 |\vec{R}|^2} \right] \frac{d\vec{\beta} \cdot \vec{n}}{dx_j} = \\ & \frac{1}{\gamma^2 (1 - \vec{\beta} \cdot \vec{n})^3 |\vec{R}|^2} \left(\frac{1}{|\vec{R}|} \left((\delta_{kj} - \beta_k \Omega_j) - n_k (n_j - \vec{n} \cdot \vec{\beta} \Omega_j) \right) - \Omega_j \dot{\beta}_k \right) \\ & - \frac{(n - \beta)_k}{\gamma^4 (1 - \vec{\beta} \cdot \vec{n})^3 |\vec{R}|^2} \left(\sum_i \frac{2\beta_i}{(1 - |\vec{\beta}|^2)^2} \dot{\beta}_i \Omega_j \right) \\ & - \frac{(n - \beta)_k}{\gamma^2 (1 - \vec{\beta} \cdot \vec{n})^3 |\vec{R}|^4} \left(2 \sum_i R_i (\delta_{ij} - \beta_i \Omega_j) \right) \end{aligned}$$

$$+ \frac{3(n - \beta)_k}{\gamma^2(1 - \vec{\beta} \cdot \vec{n})^4 |\vec{R}|^2} \left(\Omega_j \dot{\vec{\beta}} \cdot \vec{n} + \frac{1}{|\vec{R}|} \left((\beta_j - |\vec{\beta}|^2 \Omega_j) - \vec{n} \cdot \vec{\beta} (n_j - \vec{n} \cdot \vec{\beta} \Omega_j) \right) \right).$$

Die Ableitung des statischen Terms nach der Zeit t lautet

$$\frac{d}{dt} \left[\frac{(n - \beta)_k}{\gamma^2(1 - \vec{\beta} \cdot \vec{n})^3 |\vec{R}|^2} \right] = \quad (C.24)$$

$$\begin{aligned} & \sum_i \frac{d}{d(n - \beta)_i} \left[\frac{(n - \beta)_k}{\gamma^2(1 - \vec{\beta} \cdot \vec{n})^3 |\vec{R}|^2} \right] \frac{d(n - \beta)_i}{dt} \\ & + \frac{d}{d\gamma^2} \left[\frac{(n - \beta)_k}{\gamma^2(1 - \vec{\beta} \cdot \vec{n})^3 |\vec{R}|^2} \right] \frac{d\gamma^2}{dt} \\ & + \frac{d}{dR^2} \left[\frac{(n - \beta)_k}{\gamma^2(1 - \vec{\beta} \cdot \vec{n})^3 |\vec{R}|^2} \right] \frac{d|\vec{R}|^2}{dt} \\ & + \frac{d}{d\vec{\beta} \cdot \vec{n}} \left[\frac{(n - \beta)_k}{\gamma^2(1 - \vec{\beta} \cdot \vec{n})^3 |\vec{R}|^2} \right] \frac{d\vec{\beta} \cdot \vec{n}}{dt} = \\ & \frac{1}{\gamma^2(1 - \vec{\beta} \cdot \vec{n})^3 |\vec{R}|^2} \left(\frac{\Phi}{|\vec{R}|} (n_k \vec{n} \cdot \vec{\beta} - \beta_k) - \Phi \dot{\beta}_k \right) \\ & - \frac{(n - \beta)_k}{\gamma^4(1 - \vec{\beta} \cdot \vec{n})^3 |\vec{R}|^2} \sum_i \frac{2\beta_i}{(1 - |\vec{\beta}|^2)^2} \dot{\beta}_i \Phi \\ & + \frac{(n - \beta)_k}{\gamma^2(1 - \vec{\beta} \cdot \vec{n})^3 |\vec{R}|^4} 2\Phi \sum_i R_i \beta_i \\ & + \frac{3(n - \beta)_k}{\gamma^2(1 - \vec{\beta} \cdot \vec{n})^4 |\vec{R}|^2} \Phi \left(\frac{1}{|\vec{R}|} \left((\vec{n} \cdot \vec{\beta})^2 - |\vec{\beta}|^2 \right) + \vec{n} \cdot \dot{\vec{\beta}} \right). \end{aligned}$$

Die Ableitung des Strahlungsterms nach dem Ort \vec{x} lautet

$$\frac{d}{dx_j} \left[\frac{(n \times ((n - \beta) \times \dot{\beta}))_k}{(1 - \vec{\beta} \cdot \vec{n})^3 |R|} \right] = \sum_i \frac{d}{dn_i} \left[\frac{(n \times ((n - \beta) \times \dot{\beta}))_k}{(1 - \vec{\beta} \cdot \vec{n})^3 |\vec{R}|} \right] \frac{dn_i}{dx_j} + \quad (C.25)$$

$$\begin{aligned}
& + \sum_i \frac{d}{d(n-\beta)_i} \left[\frac{\left(n \times ((n-\beta) \times \dot{\beta}) \right)_k}{(1-\vec{\beta} \cdot \vec{n})^3 |\vec{R}|} \right] \frac{d(n-\beta)_i}{dx_j} + \\
& + \sum_i \frac{d}{d\dot{\beta}_i} \left[\frac{\left(n \times ((n-\beta) \times \dot{\beta}) \right)_k}{(1-\vec{\beta} \cdot \vec{n})^3 |\vec{R}|} \right] \frac{d\dot{\beta}_i}{dx_j} + \\
& + \frac{d}{d\vec{\beta} \cdot \vec{n}} \left[\frac{\left(n \times ((n-\beta) \times \dot{\beta}) \right)_k}{(1-\vec{\beta} \cdot \vec{n})^3 |\vec{R}|} \right] \frac{d\vec{\beta} \cdot \vec{n}}{dx_j} + \\
& + \frac{d}{d|\vec{R}|} \left[\frac{\left(n \times ((n-\beta) \times \dot{\beta}) \right)_k}{(1-\vec{\beta} \cdot \vec{n})^3 |\vec{R}|} \right] \frac{d|\vec{R}|}{dx_j} = \\
& = \sum_{in} \frac{\epsilon_{ink} ((n-\beta) \times \dot{\beta})_n}{(1-\vec{\beta} \cdot \vec{n})^3 |\vec{R}|} \left(\frac{1}{|\vec{R}|} \left((\delta_{ij} - \beta_i \Omega_j) - n_i (n_j - \vec{\beta} \cdot \vec{n} \Omega_j) \right) \right) \\
& + \sum_{gimn} \frac{\epsilon_{mnk} n_m \epsilon_{ign} \dot{\beta}_g}{(1-\vec{\beta} \cdot \vec{n})^3 |\vec{R}|} \left(\frac{1}{|\vec{R}|} \left((\delta_{ij} - \beta_i \Omega_j) - n_i (n_j - \vec{\beta} \cdot \vec{n} \Omega_j) \right) - \Omega_j \dot{\beta}_i \right) \\
& + \sum_{gimn} \frac{\epsilon_{mnk} n_m \epsilon_{gin} (n-\beta)_g}{(1-\vec{\beta} \cdot \vec{n})^3 |\vec{R}|} \left(\Omega_j \ddot{\beta}_i \right) \\
& + \frac{3 \left(n \times ((n-\beta) \times \dot{\beta}) \right)_k}{(n-\vec{\beta} \cdot \vec{n})^4 |\vec{R}|} \left(\Omega_j \dot{\vec{\beta}} \cdot \vec{n} + \frac{1}{|\vec{R}|} \left((\beta_j - |\vec{\beta}|^2 \Omega_j) - \vec{\beta} \cdot \vec{n} (n_j - \vec{\beta} \cdot \vec{n} \Omega_j) \right) \right) \\
& - \frac{\left(n \times ((n-\beta) \times \dot{\beta}) \right)_k}{(n-\vec{\beta} \cdot \vec{n})^3 |\vec{R}|^2} \left(n_j - \Omega_j \vec{\beta} \cdot \vec{n} \right) .
\end{aligned}$$

Dieser Term lässt sich unter Verwendung einiger Substitutionen auch kürzer schreiben. Er lautet

$$\begin{aligned}
& \frac{d}{dx_j} \left[\frac{\vec{n} \times ((\vec{n} - \vec{\beta}) \times \dot{\vec{\beta}})}{(1-\vec{\beta} \cdot \vec{n})^3 |\vec{R}|} \right] = \\
& = C_1 \left(\vec{v}_1 \times \vec{z} + \vec{n} \times ((\vec{v}_2 \times \dot{\vec{\beta}}) + ((\vec{n} - \vec{\beta}) \times \vec{v}_3)) \right) + (3C_2 v_j - C_1 w_j) \vec{n} \times \vec{z}
\end{aligned} \tag{C.26}$$

mit den Substitutionen

$$C_1 = \frac{1}{(1 - \vec{\beta} \cdot \vec{n})^3 |\vec{R}|^2}, \quad (\text{C.27})$$

$$C_2 = \frac{1}{(1 - \vec{\beta} \cdot \vec{n})^4 |\vec{R}|}, \quad (\text{C.28})$$

$$\vec{v}_1 = \vec{e}_j - \Omega_j \vec{\beta} - (n_j - \vec{\beta} \cdot \vec{n} \Omega_j) \vec{n}, \quad (\text{C.29})$$

$$\vec{v}_2 = \vec{v}_1 - \Omega_j \dot{\vec{\beta}}, \quad (\text{C.30})$$

$$\vec{v}_3 = \Omega_j \ddot{\vec{\beta}}, \quad (\text{C.31})$$

$$\vec{w} = \vec{n} - (\vec{\beta} \cdot \vec{n}) \vec{\Omega}, \quad (\text{C.32})$$

$$\vec{v} = (\dot{\vec{\beta}} \cdot \vec{n}) \vec{\Omega} + \frac{1}{|\vec{R}|} \left(\vec{\beta} - |\vec{\beta}|^2 \vec{\Omega} - \vec{\beta} \cdot \vec{n} (\vec{n} - (\vec{\beta} \cdot \vec{n}) \vec{\Omega}) \right). \quad (\text{C.33})$$

Die Ableitung des Strahlungsterms nach der Zeit t lautet

$$\frac{d}{dt} \left[\frac{\left(n \times ((n - \beta) \times \dot{\beta}) \right)_k}{(1 - \vec{\beta} \cdot \vec{n})^3 |\vec{R}|} \right] = \quad (\text{C.34})$$

$$\begin{aligned} &= \sum_i \frac{d}{dn_i} \left[\frac{\left(n \times ((n - \beta) \times \dot{\beta}) \right)_k}{(1 - \vec{\beta} \cdot \vec{n})^3 |\vec{R}|} \right] \frac{dn_i}{dt} + \\ &+ \sum_i \frac{d}{d(n - \beta)_i} \left[\frac{\left(n \times ((n - \beta) \times \dot{\beta}) \right)_k}{(1 - \vec{\beta} \cdot \vec{n})^3 |\vec{R}|} \right] \frac{d(n - \beta)_i}{dt} + \\ &+ \sum_i \frac{d}{d\dot{\beta}_i} \left[\frac{\left(n \times ((n - \beta) \times \dot{\beta}) \right)_k}{(1 - \vec{\beta} \cdot \vec{n})^3 |\vec{R}|} \right] \frac{d\dot{\beta}_i}{dt} + \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{d}{d\vec{\beta} \cdot \vec{n}} \left[\frac{\left(n \times ((n - \beta) \times \dot{\beta}) \right)_k}{(1 - \vec{\beta} \cdot \vec{n})^3 |\vec{R}|} \right] \frac{d\vec{\beta} \cdot \vec{n}}{dt} + \\
& + \frac{d}{d|\vec{R}|} \left[\frac{\left(n \times ((n - \beta) \times \dot{\beta}) \right)_k}{(1 - \vec{\beta} \cdot \vec{n})^3 |\vec{R}|} \right] \frac{d|\vec{R}|}{dt} = \\
& = \sum_{in} \frac{\epsilon_{ink} ((n - \beta) \times \dot{\beta})_n}{(1 - \vec{\beta} \cdot \vec{n})^3 |\vec{R}|} \left(\frac{\Phi}{|\vec{R}|} (n_i \vec{\beta} \cdot \vec{n} - \beta_i) \right) \\
& + \sum_{gimn} \frac{\epsilon_{mnk} n_m \epsilon_{ign} \dot{\beta}_g}{(1 - \vec{\beta} \cdot \vec{n})^3 |\vec{R}|} \left(\frac{\Phi}{|\vec{R}|} (n_i n \beta - \beta_i) - \Phi \dot{\beta}_i \right) \\
& + \sum_{gimn} \frac{\epsilon_{mnk} n_m \epsilon_{gin} (n - \beta)_g}{(1 - \vec{\beta} \cdot \vec{n})^3 |\vec{R}|} (\Phi \ddot{\beta}_i) \\
& + \frac{3 \left(n \times ((n - \beta) \times \dot{\beta}) \right)_k}{(1 - \vec{\beta} \cdot \vec{n})^4 |\vec{R}|} \left(\Phi \left(\frac{1}{|\vec{R}|} ((\vec{\beta} \cdot \vec{n})^2 - |\vec{\beta}|^2) + \dot{\vec{\beta}} \cdot \vec{n} \right) \right) \\
& + \frac{\left(n \times ((n - \beta) \times \dot{\beta}) \right)_k}{(1 - \vec{\beta} \cdot \vec{n})^3 |\vec{R}|^2} (\Phi \vec{\beta} \cdot \vec{n}) \\
& = ((C_1 2(\vec{\beta} \cdot \vec{n}) + C_2 3((\vec{\beta} \cdot \vec{n})^2 - |\vec{\beta}|^2 + |\vec{R}| \dot{\vec{\beta}} \cdot \vec{n})) \vec{n} - C_1 \vec{\beta}) \times \vec{z} + \\
& + C_1 \vec{n} \times (|\vec{R}| \ddot{\vec{\beta}} \times (\vec{n} - \vec{\beta}) + ((\vec{\beta} \cdot \vec{n}) \vec{n} - \vec{\beta} - |\vec{R}| \dot{\vec{\beta}}) \times \dot{\vec{\beta}})
\end{aligned}$$

mit den Substitutionen

$$C_1 = \frac{\Phi}{(1 - \vec{\beta} \cdot \vec{n})^3 |\vec{R}|^2}, \quad (C.35)$$

$$C_2 = \frac{\Phi}{(1 - \vec{\beta} \cdot \vec{n})^4 |\vec{R}|^2}, \quad (C.36)$$

$$\vec{z} = (\vec{n} - \vec{\beta}) \times \dot{\vec{\beta}}. \quad (C.37)$$

Anhang D

Normierung der physikalischen Größen

In diesem Anhang soll die im numerischen Teil dieser Arbeit verwendete Normierung der physikalischen Größen vorgestellt werden. Die Normierung wird am Beispiel dreier grundlegender Gleichungen, der Lorentz-Newton-Gleichung (1.36), der Liénard-Wiechert-Gleichungen (1.40) und (1.41) und der Landau-Lifschitz-Gleichung (1.37) erläutert. Für die weiteren, ebenfalls grundlegenden Gleichungen wie die Maxwell-Gleichungen oder die Gleichungen zur Strahlungsberechnung ist die Normierung analog. Ausgehend von den Gleichungen in Abschnitt 1.5 werden dimensionslose Größen definiert um schließlich die Gleichungen in dimensionslosen Einheiten angeben zu können, wie sie im numerischen Teil dieser Arbeit verwendet werden.

D.1 Entdimensionalisierung

Für alle physikalischen Größen sollen dimensionslose Größen definiert werden. Die dimensionslosen Größen werden durch eine hochgestellte Tilde \sim gekennzeichnet. Hierzu wird eine charakteristische Frequenz ω eingeführt. Die dimensionslosen Grö-

ben werden durch

$$t = \frac{1}{\omega} \tilde{t}, \quad (\text{D.1})$$

$$\vec{x} = \frac{c}{\omega} \tilde{\vec{x}}, \quad (\text{D.2})$$

$$R = \frac{c}{\omega} \tilde{R}, \quad (\text{D.3})$$

$$d\tau = \frac{1}{\omega} d\tilde{s}, \quad (\text{D.4})$$

$$F^{\mu\nu} = \frac{\omega m_e}{e} \tilde{F}^{\mu\nu}, \quad (\text{D.5})$$

$$F_{\text{auss}}^{\mu\nu} = \frac{\omega m_e}{e} \tilde{F}_{\text{auss}}^{\mu\nu}, \quad (\text{D.6})$$

$$F_{\text{lw}}^{\mu\nu} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{\omega^2 e}{c^3} \tilde{F}_{\text{lw}}^{\mu\nu}, \quad (\text{D.7})$$

$$\tilde{F}^{\mu\nu} = \tilde{F}_{\text{auss}}^{\mu\nu} + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{\omega e^2}{m_e c^3} \tilde{F}_{\text{lw}}^{\mu\nu} \quad (\text{D.8})$$

definiert. Hierbei bezeichnen $F_{\text{lw}}^{\mu\nu}$ die Liénard-Wiechert-Felder, $F_{\text{auss}}^{\mu\nu}$ die von außen an das System angelegten Felder und $F^{\mu\nu}$ die Gesamtfelder. Die charakteristische Frequenz ω wird durch die Bedingung

$$\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{\omega e^2}{m_e c^3} \equiv 1 \quad \Rightarrow \quad \omega = 4\pi\epsilon_0 \frac{m_e c^3}{e^2} \quad (\text{D.9})$$

definiert. Somit sind die externen und internen Felder in den gleichen Einheiten

$$\frac{\omega m_e}{e} = 4\pi\epsilon_0 \frac{m_e^2 c^3}{e^3} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{\omega^2 e}{c^3} \quad (\text{D.10})$$

gegeben. Mit Hilfe der dimensionslosen Größen (D.1)-(D.8) können die grundlegenden Gleichungen aus Abschnitt 1.5 dimensionslos geschrieben werden.

D.2 Grundlegende Gleichungen in dimensionslosen Einheiten

Nun werden die Grundgleichungen in dimensionslosen Einheiten angegeben. Die Lorentz-Newton-Gleichung (1.36) lautet in dimensionslosen Einheiten

$$\frac{du^\mu}{d\tilde{s}} = \tilde{F}^{\mu\nu}(x^\mu) u_\nu + \tilde{g}^\mu = \tilde{a}^\mu, \quad (\text{D.11})$$

$$\frac{du^\mu}{d\tilde{s}} = \left(\tilde{F}_{\text{lw}}^{\mu\nu}(x^\mu) + \tilde{F}_{\text{auss}}^{\mu\nu}(x^\mu) \right) u_\nu + \tilde{g}^\mu = \tilde{a}^\mu. \quad (\text{D.12})$$

Die Liénard-Wiechert-Gleichungen (1.40) und (1.41) lauten in dimensionslosen Einheiten

$$\vec{\tilde{E}}(\tilde{x}, \tilde{t}) = \left[\frac{\vec{n} - \vec{\beta}}{\gamma^2 (1 - \vec{\beta} \cdot \vec{n})^3 \tilde{R}^2} \right]_{\text{ret}} + \left[\frac{\vec{n} \times [(\vec{n} - \vec{\beta}) \times \vec{\tilde{\beta}}]}{(1 - \vec{\beta} \cdot \vec{n})^3 \tilde{R}} \right]_{\text{ret}}, \quad (\text{D.13})$$

$$\vec{\tilde{B}}(\tilde{x}, \tilde{t}) = \left[\vec{n} \times \vec{\tilde{E}} \right]_{\text{ret}}. \quad (\text{D.14})$$

Hierbei bezeichnet $\vec{\tilde{\beta}}$ die Ableitung von $\vec{\beta}$ nach \tilde{t} . Die Landau-Lifschitz-Gleichung (1.37) lautet in dimensionslosen Einheiten

$$\tilde{g}^\mu = \frac{2}{3} \left(\frac{\partial \tilde{F}^{\mu\nu}}{\partial \tilde{x}^\xi} u^\nu u^\xi - \tilde{F}^{\mu\xi} \tilde{F}_{\nu\xi} u^\nu + (\tilde{F}_{\nu\xi} u^\xi)(\tilde{F}^{\nu\pi} u_\pi) u^\mu \right). \quad (\text{D.15})$$

Literaturverzeichnis

- [1] J. Bastardo, S. A. Ibrahim, P. F. de Córdoba, J. U. Schölzel, and Y. Ratis. Evaluation of fresnel integrals based on the continued fractions method. *Applied Mathematics Letters*, 18(1):23 – 28, 2005.
- [2] J. P. Boris. Relativistic plasma simulation-optimization of a hybrid code. *Proceeding of Fourth Conference on Numerical Simulations of Plasmas*, November 1970.
- [3] J. M. Dawson. Particle simulation of plasmas. *Rev. Mod. Phys.*, 55:403–447, Apr 1983.
- [4] P. Deuffhard. *Numerische Mathematik: Gewöhnliche Differentialgleichungen*. Walter de Gruyter, 3 edition, 2008.
- [5] P. A. M. Dirac. Classical theory of radiating electrons. *Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 167(929):148–169, 1938.
- [6] N. V. Elkina, A. M. Fedotov, C. Herzing, and H. Ruhl. Improving the accuracy of simulation of radiation-reaction effects with implicit runge-kutta-nyström methods. *Phys. Rev. E*, 89:053315, May 2014.
- [7] T. Z. Esirkepov. Exact charge conservation scheme for Particle-in-Cell simulation with an arbitrary form-factor. *Computer Physics Communications*, 135:144–153, Apr. 2001.
- [8] E. Fehlberg. Klassische runge-kutta-nyström-formeln mit schrittweitenkontrolle für differentialgleichungen $\ddot{x} = f(t, x)$. *Computing*, 10(4):305–315, 1972.
- [9] E. Hairer, S. P. Nørsett, and G. Wanner. *Solving Ordinary Differential Equations I (2Nd Revised. Ed.): Nonstiff Problems*. Springer-Verlag New York, Inc., New York, NY, USA, 1993.

-
- [10] F. H. Harlow and M. W. Evans. A machine calculation method for hydrodynamic problems. *LAMS-1956*, 1955.
 - [11] O. Heaviside. On the forces, stresses, and fluxes of energy in the electromagnetic field. *Proceedings of the Royal Society of London*, 50(302-307):126–129, 1891.
 - [12] J. D. Jackson, C. Witte, and K. Muller. *Klassische Elektrodynamik (Überarbeitete Auflage) (German Edition)*. Walter de Gruyter, 4th edition, 2006.
 - [13] J. Kruger and M. Bovyn. Relativistic motion of a charged particle in a plane electromagnetic wave with arbitrary amplitude. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 9(11):1841, 1976.
 - [14] L. D. Landau, E. M. Lifschitz, and A. Kühnel. *Lehrbuch der theoretischen Physik, 10 Bde., Bd.4, Quantenelektrodynamik*. Deutsch (Harri), 1991.
 - [15] L. D. Landau, E. M. Lifschitz, and H. G. Schöpf. *Lehrbuch der theoretischen Physik, 10 Bde., Bd.2, Klassische Feldtheorie*. Deutsch (Harri), 12 edition, 1997.
 - [16] J. Larmor. On the theory of the magnetic influence on spectra and on the radiation from moving ions. *Philosophical Magazine Series 5*, 44(271):503–512, 1897.
 - [17] J. C. Maxwell. A dynamical theory of the electromagnetic field. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London*, 155:459–513, 1865.
 - [18] R. Medina. Radiation reaction of a classical quasi-rigid extended particle. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 39(14):3801, 2006.
 - [19] A. Nikishov and V. Ritus. Pair production by a photon and photon emission by an electron in the field of an intense electromagnetic wave and in a constant field. *JEPT*, 25(6):1135, 1967.
 - [20] E. J. Nyström. Über die numerische integration von differentialgleichungen. *Acta Societatis Scientiarum Fennicae*, 50(13):1–54, 1925.
 - [21] C. Peltz, C. Varin, T. Brabec, and T. Fennel. Fully microscopic analysis of laser-driven finite plasmas using the example of clusters. *New Journal of Physics*, 14(6):065011, 2012.
 - [22] C. Peltz, C. Varin, T. Brabec, and T. Fennel. Time-resolved x-ray imaging of anisotropic nanoplasma expansion. *Phys. Rev. Lett.*, 113:133401, Sep 2014.

- [23] F. Rohrlich. The dynamics of a charged sphere and the electron. *American Journal of Physics*, 65(11):1051–1056, 1997.
- [24] H. Ruhl and C. Herzing. Equations of motion for charged particles in strong laser fields. arXiv:1611.03892, 2016.
- [25] H. Spohn. *Dynamics of Charged Particles and their Radiation Field*. Cambridge University Press, 2008.
- [26] C. Varin, C. Peltz, T. Brabec, and T. Fennel. Attosecond plasma wave dynamics in laser-driven cluster nanoplasmas. *Phys. Rev. Lett.*, 108:175007, Apr 2012.
- [27] C. Varin, C. Peltz, T. Brabec, and T. Fennel. Light wave driven electron dynamics in clusters. *Annalen der Physik*, 526(3-4):135–156, 2014.
- [28] J.-L. Vay. Simulation of beams or plasmas crossing at relativistic velocity. *Physics of Plasmas*, 15(5), 2008.
- [29] K. Yee. Numerical solution of initial boundary value problems involving maxwell's equations in isotropic media. *Antennas and Propagation, IEEE Transactions on*, 14(3):302–307, May 1966.